

**INSTITUTO TECNOLÓGICO Y DE ESTUDIOS SUPERIORES DE OCCIDENTE**  
**Departamento de Procesos Tecnológicos e Industriales**

**Sustentabilidad y Tecnología**

**PROYECTO DE APLICACIÓN PROFESIONAL (PAP)**  
**PAP4G03 Programa de Apoyo a Centros de Investigación Externos II**



**ITESO, Universidad  
Jesuita de Guadalajara**

**PAP4G03 PROGRAMA DE APOYO A CENTROS DE INVESTIGACIÓN  
EXTERNOS II**

**“Algoritmos cuánticos implementados en una computadora de diamante  
C12-C13”, Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías de la  
Universidad de Guadalajara, Guadalajara, Jalisco**

**PRESENTAN**

Ing. en Nanotecnología – Karina Chiñas Fuentes  
Ing. en Nanotecnología – Daniel Hernández Mota

Profesor PAP: Dr. Gustavo López Velázquez  
Tlaquepaque, Jalisco, mayo 2019

## ÍNDICE

### Contenido

REPORTE PAP .....	2
Presentación Institucional de los Proyectos de Aplicación Profesional .....	2
Resumen .....	2
1. Introducción .....	3
1.1 Objetivos .....	3
1.2 Justificación.....	4
1.3 Antecedentes .....	6
1.4 Contexto.....	7
2. Desarrollo .....	10
2.1 Sustento teórico y metodológico .....	10
2.2 Planeación y seguimiento del proyecto .....	22
3. Resultados del trabajo profesional.....	38
4. Reflexiones del alumno o alumnos sobre sus aprendizajes, las implicaciones éticas y los aportes sociales del proyecto.....	62
5. Conclusiones .....	68
6. Bibliografía.....	70
Anexos.....	75

# REPORTE PAP

## Presentación Institucional de los Proyectos de Aplicación Profesional

*Los Proyectos de Aplicación Profesional (PAP) son una modalidad educativa del ITESO en la que el estudiante aplica sus saberes y competencias socio-profesionales para el desarrollo de un proyecto que plantea soluciones a problemas de entornos reales. Su espíritu está dirigido para que el estudiante ejerza su profesión mediante una perspectiva ética y socialmente responsable.*

*A través de las actividades realizadas en el PAP, se acreditan el servicio social y la opción terminal. Así, en este reporte se documentan las actividades que tuvieron lugar durante el desarrollo del proyecto, sus incidencias en el entorno, y las reflexiones y aprendizajes profesionales que el estudiante desarrolló en el transcurso de su labor.*

## Resumen

Este escrito trata el proceso de investigación teórica enfocada en la simulación de una computadora cuántica basada en diamante dopado con isótopos de carbono-13 sometida a un campo magnético. Para ello, se explican los principios básicos y más importantes de la teoría de la Mecánica Cuántica y se expone la matemática que resuelven las ecuaciones para simular los sistemas cuánticos.

El objetivo principal de esta investigación es desarrollar las destrezas necesarias para caracterizar las propiedades de la computadora cuántica y evaluar su calidad de funcionamiento bajo parámetros que se podrían, en principio, modificar; tal como el número de qubits y las características del campo magnético al que se somete.

Durante esta investigación, se logró llegar a la simulación teórica de un sistema de hasta  $N$  partículas que interaccionan de forma diferente bajo un campo magnético variante en el tiempo. Para dicho sistema, se derivó a una metodología que simula el proceso de Teleportación cuántica. También, se hizo un análisis detallado de las

características del sistema que determinaban su comportamiento, basado en la energía del sistema.

Finalmente, se describen los principales aprendizajes y logros que se obtuvieron de esta estancia de investigación, tanto académico como social. Tal como haber logrado un vínculo con ITESO y CUCEI para investigación en física teórica, ya que sólo se tenía para investigación experimental. Además, se redactaron notas sobre lo que se hizo durante esta investigación para que estas fuesen publicadas como un libro y estén al alcance de quienes deseen entender el tema.

## 1. Introducción

### 1.1 Objetivos

Este proyecto busca el desarrollo de diversas destrezas dentro del área de computación cuántica para hacer frente a conflictos en la investigación y en la sociedad, fortaleciendo de esta manera el vínculo de colaboración existente entre los centros de investigación y los alumnos del ITESO. Mejorando así, el desempeño de investigación al agregar valor al nivel académico de ambas instituciones.

Las destrezas pertinentes a desarrollar en el proyecto son la elaboración de varios programas en FORTRAN y PYTHON que puedan simular una computadora cuántica, con diferentes números de qubits; ya que con esto, será posible determinar el comportamiento de la computadora cuántica y esto ayudará identificar ciertos problemas del sistema cuántico que pudieran existir debido a distintos elementos, como ruido o perturbaciones dentro del mismo sistema para generar una representación más real y la factibilidad de realizarla; contribuyendo así al mejoramiento científico y tecnológico desde una perspectiva teórica.

También, se busca redactar notas en LATEX sobre computación e información cuántica, con el fin de que sean notas de fácil acceso al tema y así contribuir al desarrollo de la ciencia y divulgación del conocimiento.

Para ello, pensamos utilizar diferentes interfaces para facilitar el trabajo tales como JUPYTER y OVERLEAF, ya que en ellas es posible programar en los lenguajes mencionados y seguir trabajando en línea de una manera eficaz.

## 1.2 Justificación

El campo de la investigación científica desde el punto de vista teórico enfocado a la computación cuántica no tiene un impacto inmediato en la generación de tecnología o resolución de problemáticas sociales. En realidad, los avances y las contribuciones de este tema acercan cada vez la posibilidad de que se puedan solucionar, de una manera más eficiente, ciertos problemas de computación que son complejos sirviendo esto como un beneficio para la humanidad. Algunos de los conflictos que se buscan resolver en la aplicación de computadoras cuánticas son el descubrimiento de fármacos mediante la simulación de interacciones moleculares (1), reducción de tiempo en optimización de procesos y encriptación de información (2; 3). Sin embargo, la implementación de estos sistemas sigue estando limitada, y hoy en día todavía faltan varios avances en los algoritmos cuánticos, así como en la arquitectura de las mismas computadoras para poder llegar a una tecnología tan sofisticada. Por lo que, en la actualidad, el principal reto que se tiene que superar es determinar los sistemas físicos en los cuales se pueda trabajar la computación cuántica de manera eficaz sin que esta sea afectada por el ruido que genera el medio ambiente. Hacer esto en la práctica requiere de experimentación costosa y complicada de hacer, ya que las condiciones necesarias para una computadora cuántica son muy específicas, como mantener temperaturas cercanas al cero absoluto, manipular nanoestructuras con alta precisión y contar con ultra alto vacío, es decir, una presión 10 billones de veces menor a la atmosférica (4). Es por ello que es importante llevar a cabo la investigación teórica, ya que puede prevenir un gasto de recursos (tales como de materiales, económicos o de tiempo) y, al mismo tiempo, se modela un comportamiento de los resultados como si se tratara de investigación práctica (5), identificando con posterioridad si la implementación de la simulación es factible en la realidad.

En consecuencia, la investigación enfocada al ámbito de la computación cuántica requiere de un acercamiento teórico para determinar la viabilidad del sistema y posteriormente un desarrollo experimental. Por lo que es necesario hacer simulaciones dada la dificultad para replicar este tipo de sistemas físicos de manera experimental. Al simular, se crea una versión aproximada del modelo cuántico, para posteriormente decidir con qué valores, parámetros y condiciones óptimas se pueden trabajar. De esta forma, se genera un impacto beneficioso y directo en los centros de investigación, ya que la investigación teórica conlleva una reducción de recursos para el estudio del tema en cuestión.

De manera local, se pueden obtener beneficios que no están ligados a la computación cuántica pero sí a la investigación y a la cultura científica. Al contribuir a este tipo de investigaciones para generar información, se abren las puertas a las personas que buscan introducirse o involucrarse en estos tópicos, desarrollando en paralelo un acercamiento mayor al desarrollo científico-tecnológico que funge como herramienta para ayudar a la sociedad. La divulgación y el acceso de información genera una transformación en la cultura con el objetivo de cambiar paulatinamente las reglas de conducta, los medios y las tecnologías usadas para dar una solución de diversos problemas (6).

Por otra parte, ITESO tiene un beneficio directo debido a que, con el conocimiento adquirido, se puede introducir el tema de computación cuántica a cursos como Modelado Molecular, Física Cuántica, Simulación Matemática e inclusive Álgebra Lineal. Esto es factible debido a que este tema genera un mejor entendimiento sobre el alcance de la física cuántica y las matemáticas desde un enfoque práctico. Esto mejora la calidad de educación ya que se puede comenzar a abordar un tema de especialización, relativamente complejo, desde la licenciatura. Complementario a esto, junto con la ayuda de la Sociedad de Alumnos de Nanotecnología de ITESO, es posible realizar pláticas de cómo fue nuestra experiencia PAP en investigación teórica para que los estudiantes de la carrera tengan una visión amplia y un mejor

panorama de lo que podrían elegir como opción ya sea en el ámbito de investigación o trabajo.

### 1.3 Antecedentes

El grupo de investigación encuadrando el área respectiva de la Información y Computación Cuántica está conformado por dos integrantes, el Dr. Andrei Klimov y el Dr. Gustavo López Velázquez; ambos siendo investigadores Nivel II del Sistema Nacional de Investigadores y profesores investigadores titulares de la Universidad de Guadalajara. El Dr. Klimov se encarga de la investigación en Óptica e Información Cuántica mientras que el Dr. López se enfoca en el tópico de Computación Cuántica siendo todas estas ramas temas sobre Física fundamental avanzada.

En el año 2002 se instauró el proyecto de Computación Cuántica en un Sistema en Cadena con Átomos Paramagnéticos de Espín (spin) Nuclear de  $\frac{1}{2}$  en colaboración con la Institución Los Alamos National Laboratory (LANL). No obstante, este proyecto recibió muy poco financiamiento debido a la problemática general que se tiene en las computadoras cuánticas: el sistema no es escalable y también el ruido externo produce errores en el funcionamiento, así como la pérdida de propiedades cuánticas de los estados entrelazados. Después de hacer las simulaciones, durante 10 años, se pudo determinar que este modelo no era un sistema cuántico viable para realizar físicamente. Por lo que, en el año 2012, el Dr. López consideró independientemente un modelo alternativo, el cual está compuesto por átomos de carbono en forma alotrópica de diamante dopados con el isótopo C13 debido a que este también cuenta con la propiedad de tener spin de  $\frac{1}{2}$ . De igual manera, en la literatura se hablaba de que este sistema cuántico presentaba una capacidad de poder mantener sus propiedades aún a temperatura ambiente (7) .

Antes de formar una colaboración con el ITESO para poder llevar a cabo el Proyecto de Aplicación Profesional en esta área, se estaban definiendo los parámetros del modelo a utilizar con el *algoritmo cuántico de Shor*, sin embargo, no había muchos

avances en el tema. Hoy en día todavía es necesario implementar algoritmos que en principio simulen el sistema cuántico y determinar su evolución en el tiempo.

El semestre pasado, de agosto a diciembre del 2018, se desarrollaron 10 códigos en PYTHON y FORTRAN los cuales lograban simular de manera eficiente varios sistemas ideales de 1, 2 y 3 qubits. En estos códigos se logró modelar un sistema con distintas compuertas cuánticas para la generación de Estados de Bell, así como el fenómeno de Teleportación cuántica. Estos sistemas cuánticos fueron basados en una proposición de utilizar una computadora de diamante con átomos de carbono-12 (C12) agregando isótopos de carbono-13 (C13) quienes tienen un spin de  $\frac{1}{2}$  por lo que sería factible utilizar un campo magnético variante en el tiempo para modificar estos estados y a su vez, hacer una representación de la computación cuántica. Lo importante de esta proposición es que se puede generalizar a otros sistemas cuánticos similares y así mismo cuenta con características particulares que facilitan su resolución: no se tiene un momento lineal debido a que la partícula se encuentra dentro de un enlace por lo que no cuenta con energía cinética (8). También se hizo la redacción de notas relacionadas al tema en LATEX, pero estas no fueron culminadas.

Para este segundo PAP, se piensa trabajar primeramente en una simulación de una computadora cuántica de 4 qubits, y la generalización para N qubits. Posterior a esto se piensa agregar ruido al sistema para verificar cuándo es donde empieza a fallar el sistema físico.

## 1.4 Contexto

Desgraciadamente, factores de la historia de México, tales como el Porfiriato, la Revolución y sus periodos de limitar la educación a clases sociales privilegiadas, causaron que hubiera un retraso en el impulso científico en el país (9). De hecho, durante casi un siglo (desde el año 1820 hasta 1929) no ocurrió ninguna relación importante entre la Ciencia y el Estado debido a inestabilidades y fenómenos sociales las cuales impidieron que la ciencia y la tecnología coadyuvaran de forma importante y sistemática al desarrollo nacional. Posteriormente al año 1929,



comenzó a haber un reducido ambiente para promover la investigación científica, no obstante, aún después de once décadas, todavía no se cuenta con un sistema de investigación y desarrollo tecnológico útil para fortalecer el PIB (Producto Interno Bruto) (10). Estos rezagos en la historia hacen que hoy en día existan varios retos para tener un buen desarrollo científico y tecnológico. Entre estos retos se encuentra llevar a cabo una mejora a diversos factores como la divulgación científica, la inversión, la infraestructura, el vínculo entre la industria y la academia, las políticas nacionales y los recursos humanos.

A pesar de que el porcentaje del PIB, que se invierte en gastos enfocados a la investigación y el desarrollo, ha ido aumentando de 0.26% en 1996 a 0.53% en el 2014, no fue suficiente para tratar los diversos conflictos que se vivían y viven en México. En el 2015 se registró un valor de 0.552 del %PIB destinado a esta área, porcentaje menor que el promedio de América Latina y el Caribe, con cifras de 0.767%, posicionándonos en el lugar número 32 de 74 países que registraron sus datos para el mismo año (11). En los datos registrados del mismo año se encuentran valores que van de 0.04% a 4.27%.

Por otra parte, en el año 2017 el CONACYT (Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología) sufrió un recorte del 23% en referencia a su presupuesto otorgado en el 2016, causando que el dinero fuera insuficiente para sostener los diversos programas de becas con los que cuenta; incluso afirmaron que no habría beca alguna para diversos encabezados de posgrados para ese año en curso (12). Para inicios del año 2018, se le volvió a reducir con un 3.7% respecto a lo asignado para el año 2017; se cree que uno de los principales motivos ha sido el deterioro del valor de la moneda gracias a la inflación (13). Este recorte afectó a todos los campos de investigación científica en México, perturbando por lo tanto al grupo de Investigación enfocada a la Computación e Información Cuántica.

Sin embargo, cabe mencionar que el primero de diciembre de 2018, hubo cambio de la presidencia en México y por lo tanto hubo un ajuste de presupuesto a diversas

áreas del país. Semanas después de que el presidente actual, Andrés Manuel López Obrador, tomara la presidencia, se hizo público que por cuarto año consecutivo, el área de Ciencia y Tecnología recibiera otro recorte de 13.6%, una diferencia de hasta más de 6 millones de pesos mexicanos con respecto al presupuesto pasado; haciendo que haya una severa afectación en las actividades que respectan a esta área. Algunos de los principales afectados son (14): el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT), la Agencia Espacial Mexicana, Centro de Investigación y Estudios Superiores del Instituto Politécnico Nacional (CINVESTAV), la Universidad Autónoma de México (UNAM) y la Academia Mexicana de Ciencias (AMC), quien ha anunciado que suspenderá actividades por falta de recursos (15).

Por lo mismo, los grupos que hacen investigación en el campo de computación cuántica son muy reducidos. Existe la División de Información Cuántica (DICU) de la Sociedad Mexicana de Física, donde el Dr. Klimov es miembro, la cual ha mostrado actividades de integración como oferta de becas patrocinadas por diversas instituciones en Óptica Cuántica, Materia Fría e Información Cuántica (16). Referente a la Computación Cuántica, hay un grupo que se dedica específicamente al desarrollo de Algoritmos Cuánticos, el cual está siendo dirigido por el Dr. Salvador E. Venegas-Andraca, quien también es miembro de la DICU y ha escrito varios documentos respecto a Computación Cuántica, Algoritmos Cuánticos, Caminatas Cuánticas y Mecánica Cuántica. Pero en contraste con las instituciones que se encargan de investigar, todavía no hay empresas que estén implementando esta tecnología.

Respecto a la Computación Cuántica en otros países, existen diversas empresas privadas y empresas emergentes que ven por su desarrollo y la aplicación para la solución de problemas. Algunos de estas empresas son IBM, Rigetti Computing, 1Qbit, D-Wave y QxBranch, quienes tratan temas de *Machine Learning*, *hardware* y *software* cuántico, algoritmos cuánticos, simulaciones de sistemas cuánticos, análisis de riesgo y problemas financieros. Por ejemplo, una de las empresas

emergentes, QxBranch, logró recabar \$8,468,722 dólares estadounidenses en un periodo de 4 años (17). Además de ello, algunos de los gobiernos que han mostrado interés en su desarrollo han sido Reino Unido, la Unión Europea y Estados Unidos (18).

## 2. Desarrollo

La computación cuántica es un tema que requiere de fundamentos teóricos basados en la mecánica cuántica y computación. Por ello, en esta sección, se tratarán conceptos elementales que hacen posible esta investigación, así como la metodología necesaria para su realización y los avances que se han obtenido durante la primera mitad del semestre junto con una posible propuesta de mejora.

### 2.1 Sustento teórico y metodológico

Para comenzar a entender la computación cuántica, es necesario remontarnos a las bases de la mecánica cuántica. Como tal, la mecánica cuántica es una teoría matemática que describe el comportamiento e interacción de fenómenos atómicos y subatómicos también conocidos como sistemas cuánticos (SC). Los SC tienen escalas dimensionales de Angstroms<sup>1</sup>, generando efectos que no se observan en sistemas clásicos, por lo que utilizar las ecuaciones de movimiento clásicas no es suficiente para poder describir completamente el comportamiento de los fenómenos clásicos (19).

Cuando se trabaja con un SC, el principal objetivo es obtener la *función de onda*, representada por la letra griega  $\Psi$ , de dicho sistema. La función de onda se obtiene al resolver la *ecuación* de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad [2.1]$$

---

<sup>1</sup> Unidad de medición referente a longitud; denotado por el símbolo Å, dónde  $1\text{Å} = 10^{-10} \text{ m}$ .  
FO-DGA-CPAP-0017

Donde  $\hat{H}$  es el operador *Hamiltoniano* que describe la evolución del sistema en el tiempo según la energía en el mismo,  $i$  es el número complejo  $\sqrt{-1}$  (notar que esto indica que  $\Psi$  es una función compleja<sup>2</sup>) y  $\hbar$  es la constante de Planck reducida. Es usual encontrar a la ecuación de Schrödinger de la forma

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hat{P}^2}{2m} \Psi + V(\mathbf{r}, t) \Psi \quad [2.2]$$

Donde  $\mathbf{r}$  es la posición en el espacio tridimensional,  $t$  es el tiempo,  $m$  hace referencia a la masa de la partícula en cuestión,  $\hat{P}$  es el operador momento y  $V(\mathbf{r}, t)$  es la energía potencial al que se encuentra sometido el sistema (20). Haciendo que el Hamiltoniano se pueda expresar como:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t) \quad [2.3]$$

Por otra parte, también se puede tener un sistema cuya energía potencial no esté variando en el tiempo, haciendo que el Hamiltoniano quede independiente del tiempo; por lo general, a un Hamiltoniano independiente del tiempo (también conocido como Hamiltoniano conservativo) se le expresa como  $\hat{H}_0$ . Más adelante se apreciará mejor sobre la importancia de la distinción entre un Hamiltoniano dependiente del tiempo a uno independiente del tiempo.

Una ecuación aún más general que la ecuación de Schrödinger, es la ecuación de Dirac, la cual incorpora propiedades relativistas de una partícula (21). En su forma reducida por unidades naturales<sup>3</sup>, esta ecuación se expresa de la forma:

$$(i\partial - m) \Psi = 0 \quad [2.4]$$

---

<sup>2</sup> Un complejo se expresa como  $z = a + ib$ ;  $a$  es la parte real y  $b$  es la parte imaginaria de  $z$ .

<sup>3</sup>  $\hbar = 1$ .

La ecuación de Dirac fue crucial para encontrar propiedades intrínsecas de las partículas, que la ecuación de Schrödinger no fue capaz de predecir. Una de las consecuencias principales de la ecuación de Dirac fue la necesidad de la existencia del *spin*<sup>4</sup> en las partículas.

La función de onda de un SC se caracteriza por cumplir la ecuación de continuidad

$$\nabla \cdot \vec{J} = -\frac{\partial}{\partial t}\rho \quad [2.5]$$

Donde

$$\rho = |\Psi|^2, \quad \vec{J} = \frac{i}{2m} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \quad [2.6]$$

Siendo  $\Psi^*$  el conjugado de la función de onda y  $|\Psi|^2$  su módulo al cuadrado. Esto como consecuencia trae que

$$\int_{\varepsilon} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3x = 1 \quad [2.7]$$

Lo que, matemáticamente significa que la función de onda es cuadrado integrable y, físicamente, significa que la probabilidad total del evento descrito por  $\Psi$  se conserva en 1; independientemente del tiempo (21; 22).

Para esta investigación, se utilizará la *notación de Dirac*, también conocida como notación Bra-Ket; en esencia, la notación de Dirac aborda un análisis de la función de onda como un *estado* descrito por un vector columna  $|\Psi\rangle$  compuesto como una combinación lineal de los vectores de la base del espacio de Hilbert<sup>5</sup>  $\mathbf{H}$ ; por lo que, la ecuación 2.1 tomaría la forma de

---

<sup>4</sup> Más adelante se explicará mejor este concepto.

<sup>5</sup> Espacio complejo completo de dimensión finita o infinita cuyo contenido se caracteriza por ser cuadrado integrable **Fuente especificada no válida..**

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\Psi\rangle \quad [2.8]$$

Para este proyecto, es vital considerar el spin de las partículas para obtener una descripción correcta del SC. No obstante, en lugar de resolver para la ecuación de Dirac, se resuelve para la ec. de Pauli<sup>6</sup> (también conocida como ecuación de Schrödinger-Pauli); la cual es una modificación de la ec. de Schrödinger. La ec. de Pauli considera los vectores de Pauli<sup>7</sup>  $\vec{\sigma}$  como parte del Hamiltoniano; por lo que, su ecuación es de la forma de

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \left( \frac{(\vec{\sigma} \cdot \hat{p})^2}{2m} + V(x, t) \right) |\psi\rangle \quad [2.9]$$

Con la notación de Dirac, la probabilidad del evento  $|\Psi\rangle$  , mostrado en la ecuación 2.7, se encuentra al realiza el *producto interno* del vector consigo mismo

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = 1 \quad [2.10]$$

En esta expresión,  $\langle \Psi |$  representa al vector transpuesto conjugado de  $|\Psi\rangle$  , el cual se lee como el vector bra del estado  $\Psi$  (22); este producto interno representa la *proyección* del estado del vector en bra sobre el estado del vector en ket.

Es importante mencionar que el Hamiltoniano conservativo  $\hat{H}_o$  es un operador *observable*, esto quiere decir que es *hermítico*<sup>8</sup>, por lo que cuenta con ciertas propiedades importantes: sus eigenvalores son de carácter real y sus eigenvectores son ortogonales (22). Como consecuencia, uno puede calcular la energía asociada

---

<sup>6</sup> Esta ecuación es el límite no relativista de la ec. de Dirac.

<sup>7</sup> Los cuales tienen acción sobre el spin de la partícula; al igual que el concepto de spin, estos vectores se explicarán mejor más adelante.

<sup>8</sup> El operador y su transpuesto conjugado son equivalentes.

(su eigenvalor) a cada vector de la base del espacio de Hilbert al resolver la ecuación de eigenvalores

$$\hat{H}_o |n\rangle = E_n |n\rangle \quad [2.11]$$

Siendo  $|n\rangle$  un vector de la base del espacio de Hilbert. Es por esa razón, y por la ecuación 2.8, que podemos representar al estado de un SC de la forma

$$|\Psi\rangle = \sum_n^{\dim(\mathbf{H})} C_n(t) |n\rangle \quad [2.12]$$

Con estos fundamentos, en particular desde una perspectiva matemática, se puede generar un SC específico el cuál se define como un set de dos estados arbitrarios con una base  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$  para que el vector  $|\Psi\rangle$  pueda ser representado como:

$$|\Psi\rangle = C_0 |0\rangle + C_1 |1\rangle \quad [2.13]$$

A este SC se le conoce como bit cuántico (*qubit* por sus siglas en inglés). Esto se da debido a que es un objeto matemático que tiene solamente dos estados, por lo que se puede utilizar para guardar de alguna manera información y para computar. La información almacenada se puede ver reflejada en los coeficientes complejos correspondientes al estado que se está analizando y se puede modificar al aplicar algún potencial variante (23). Por lo tanto, para determinar los coeficientes respectivos se tiene que hacer uso de la ecuación de Schrödinger. Este principio básico es lo que hace que la computación cuántica sea posible. El análogo clásico se puede pensar como el bit haciendo referencia a un estado cero o un estado uno; pero una de las diferencias más notables entre el sistema clásico y el cuántico, es que el qubit puede tener una superposición de los estados debido a su naturaleza matemática. No obstante, para poder tener información acerca del qubit es necesario hacer una *medición*, lo cual causaría el *colapso de la función*<sup>9</sup> de onda a

---

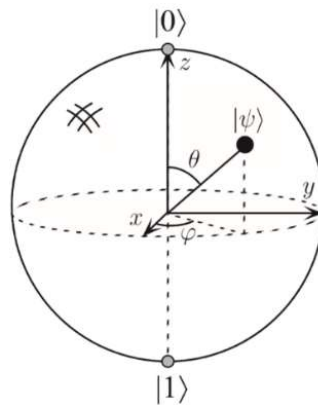
<sup>9</sup> La función de onda deja de ser cuadrado integrable (22).

uno de los dos estados. Por lo que lo único que se observaría sería un bit clásico con cierta probabilidad de ser cero o uno, perdiendo así información adicional del SC (23), o manipulando de manera estratégica para crear algoritmos prácticos.

Para representar un qubit se utiliza el concepto llamado la esfera de Bloch (véase la **Figura 1**). Esto se puede lograr modificando los coeficientes  $C_0$  y  $C_1$  de la ecuación 2.13 por una selección dónde se utilizan ciertos ángulos para describir el sistema propiamente desde el punto de vista esférico (24). La ecuación que representa la esfera de Bloch es

$$|\Psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + e^{i\varphi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle \quad [2.14]$$

La ecuación 2.14 permite que el sistema cuántico se pueda implementar como una esfera, ya que se cuentan con distintos ángulos con los cuales se puede ubicar algún punto en su superficie. Es fácil determinar que la magnitud al cuadrado de este SC siempre es 1. Por ende, la esfera de Bloch se utiliza para apreciar geoméricamente los estados del SC, es decir de un qubit. Sin embargo, cabe mencionar que esta descripción está limitada a el uso de un solo qubit.



**Figura 1. Esfera de Bloch. Visualmente, el estado  $|\Psi\rangle$  se puede determinar gracias al valor de los ángulos  $\theta$  y  $\varphi$ , con esto se puede determinar cualquier estado de un qubit (24).**

Para el caso de múltiples qubits, se utiliza la función de onda para la descripción del SC. En específico para dos qubits, se tiene una base de cuatro estados debido a



las posibles combinaciones que se pueden obtener de los estados individuales, por lo que la función de onda queda de la siguiente manera:

$$|\Psi\rangle = C_{00} |00\rangle + C_{01} |01\rangle + C_{10} |10\rangle + C_{11} |11\rangle \quad [2.15]$$

Para este y los siguientes casos se siguen cumpliendo todas las condiciones de normalidad de los sistemas cuánticos. Se puede obtener una expresión generalizada para un sistema de  $n$  qubits empleando una notación de sumatoria. En una base compuesta por los  $n$  qubits expresada como  $\{|\alpha\rangle = |\alpha_n \dots \alpha_1\rangle\}$  para cada valor definido como  $\alpha_i = 0,1$  se tiene un espacio de Hilbert con dimensión igual a  $2^n$ . El SC correspondiente queda de la forma

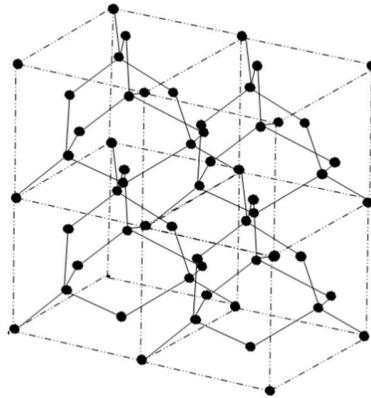
$$|\Psi\rangle = \sum_k^{2^n} C_k |\alpha\rangle \quad [2.16]$$

Al hacer la expansión de sumatoria para cualquier  $n$ , se puede obtener la ecuación que representa cualquier estado.

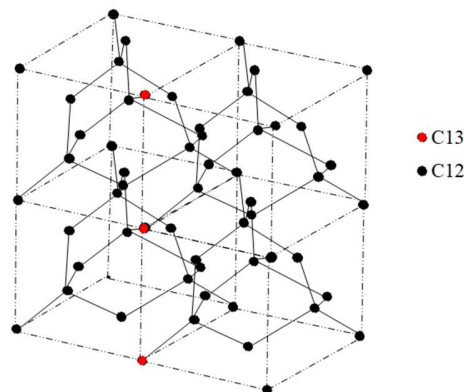
Para poder manipular un qubit, es necesario utilizar compuertas lógicas; desde el PAP I, se propuso un sistema físico (SF) que se encargara de generar las compuertas para poder manipular diversos estados y así recrear algoritmos cuánticos importantes de la computación cuántica (tales como la formación de estados de Bell y la teleportación cuántica). Nuestro SF hace uso del spin nuclear de fermiones<sup>10</sup>, lo cual permite reproducir un sistema que solamente se mantiene con dos estados (spin arriba y spin abajo) haciéndolo un candidato ideal para representar un qubit. Debido a esto, el SF utilizado consta de una estructura cristalina del diamante (véase **Figura 2**) compuesta en general de carbono-12 (C12), donde se cambian  $n$  átomos alineados en una misma dirección (eje Z) por isótopos de carbono-13 (C13). Esto se puede observar en la **Figura 3**. Los átomos de C13 tienen un spin  $\frac{1}{2}$ , en comparación con los átomos de C12, con spin 0.

---

<sup>10</sup> Partículas de spin semi-entero.  
FO-DGA-CPAP-0017



**Figura 2. Estructura cristalina del diamante. Consta de una estructura por ser cúbica centrada en las caras (CCC) (25).**



**Figura 3. Sistema físico utilizado. En esta estructura de diamante, se sustituyeron tres átomos de C12 por otros de C13. Debido al spin que tienen estas partículas, se pueden aplicar campos magnéticos para interactuar con ellos (25).**

Para entender la razón de utilizar este sistema, es importante comprender el spin. En términos coloquiales, el spin se puede interpretar como una descripción del momento angular intrínseco que funge como una rotación en el propio eje<sup>11</sup> de la

<sup>11</sup> Estrictamente, la idea de rotación viene de una perspectiva clásica, es errónea desde el punto de vista cuántico debido a que no se carece de sentido hablar de la rotación de una partícula desde que esta no se visualiza como un cuerpo sino como un evento físico que sigue el comportamiento de una función de onda probabilística. No obstante, para los propósitos del escrito, se menciona para que el concepto se pueda entender con facilidad.

partícula (23). Entonces, si se determina el valor del momento angular total, y también se restringe a las partículas de tener momento lineal (y por ende eliminar el momento angular orbital), se puede hacer una equivalencia de que el momento angular total estaría dado simplemente por la contribución del spin. El momento angular total está ligado al momento magnético descrito por

$$\vec{m} = \gamma \vec{J} \quad [2.17]$$

Donde  $\vec{m}$  es el momento magnético,  $\gamma$  es la constante giromagnética del C13,  $\vec{J}$  es el momento angular total<sup>12</sup>  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ ; siendo  $\vec{L}$  el momento angular orbital (en este caso, debido al sistema físico, su valor es equivalente a 0)<sup>13</sup>,  $\vec{S}$  es el spin. Por lo que, la ecuación 2.17 toma la forma de

$$\vec{m} = \gamma \vec{S} \quad [2.18]$$

Es importante aclarar que el spin se puede considerar como un vector operador, por lo que tiene componentes en los ejes “x”, “y”, y “z”<sup>14</sup>. Así mismo se pueden tener otros operadores relacionados que se reconocen como operadores escaleras del spin. Estos operadores actúan de manera importante debido a que tienen una acción directa ante los estados del SC.

Una herramienta matemática que se va a utilizar para los cálculos, son los operadores escalera, los cuales se definen como  $S_+ = S_x + iS_y$  y  $S_- = S_x - iS_y$ . La acción sobre los dos estados base del sistema cuántico se puede observar en las siguientes ecuaciones<sup>15</sup>.

$$S_+ |0\rangle = 0, \quad S_+ |1\rangle = \hbar |0\rangle \quad [2.19]$$

<sup>12</sup> No confundir con la definición mostrada en la ecuación 2.6.

<sup>13</sup> Esto se explicará posteriormente.

<sup>14</sup> Cada componente tiene una matriz asociada, las matrices están dadas por las matrices de Pauli.

<sup>15</sup> Esto se puede demostrar al transformar los kets en su forma vectorial y a los operadores en su forma matricial

$$S_- |0\rangle = \hbar |1\rangle, \quad S_- |1\rangle = 0 \quad [2.20]$$

Determinar este comportamiento es crítico debido a que son parte de la ecuación de Schrödinger.

Al tener un momento magnético, se tiene un término de energía asociado,  $U$ , a un campo magnético externo  $\vec{B} = (b \cos(\theta), -b \sin(\theta), B_o(z_i))$ , con  $\theta = \omega t + \varphi$ , dada por la expresión

$$U = -\vec{m} \cdot \vec{B} = -\gamma \vec{S} \cdot \vec{B} \quad [2.21]$$

Para tomar en cuenta el spin en la ecuación de Schrödinger es necesario hacer algunas modificaciones ya que se incorporan estas componentes del spin en forma de las matrices de Pauli  $\sigma$ , obteniendo la ecuación de Pauli (ver ecuación 2.9). Es importante notar que al forzar que la partícula esté localizada (es decir, que se encuentre fija gracias al enlace atómico en la red del diamante), deja de tener momento lineal y la ecuación de Schrödinger se simplifica, facilitando su resolución; Por ende, al no haber una cantidad de movimiento e incorporar la energía, se tiene solamente que contar el potencial que está compuesto por la energía asociada al campo magnético; así mismo, la interacción que existe entre los qubits ( $U_{int}$ ) del SC. La interacción entre partículas se considera como la constante a que cuantifica como un spin afecta a otro y se denota como interacción de Ising (26). Por lo que la expresión de la ecuación de Pauli queda reducida a

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = V(x, t) |\psi\rangle = \left( -\gamma \vec{S} \cdot \vec{B} + U_{int} \right) |\psi\rangle \quad [2.22]$$

Esta ecuación se utiliza para describir el comportamiento de los estados del qubit debido a que solamente se modifican los coeficientes complejos ya que surgen cambios a través del tiempo y por ende se ven afectadas las probabilidades. Cuando

se trata el potencial, surgen dos conceptos muy importantes para la investigación: la frecuencia de Rabí  $\Omega$

$$\Omega = \gamma b \quad [2.23]$$

y la frecuencia de Larmor<sup>16</sup> para el qubit  $i$ -ésimo  $\tilde{\omega}_i$

$$\tilde{\omega}_i = \gamma B_o(z_i) \quad [2.24]$$

De la ecuación 2.17, es posible ver que se puede expresar el potencial como una suma de potenciales, uno dependiente del tiempo con otro independiente del tiempo; de tal forma que quede como

$$V(x, t) = \hat{H}_o + \hat{W}(t) \quad [2.25]$$

Sabemos que, cuando resolvemos para  $\hat{H}_o$  obtenemos la energía asociada al estado. Gracias a que en el PAP I se trabajó para energías de sistemas que contenían 1, 2 y 3 qubits, rápidamente logramos encontrar una ecuación que nos dieran las energías para  $N$  qubits, expresada en la ecuación 2.11, la cual toma la forma de<sup>17</sup>

$$E_n = -\frac{\hbar}{2} \left[ \sum_{n=1}^N (-1)^{\alpha_n} \tilde{\omega}_n + \frac{1}{2} J \sum_{n=1}^{N-1} (-1)^{\alpha_n + \alpha_{n+1}} + \frac{1}{2} J' \sum_{n=1}^{N-2} (-1)^{\alpha_n + \alpha_{n+2}} \right] \quad [2.26]$$

Donde,  $E_n = E_{\alpha_n, \dots, \alpha_1}$ ,  $J$  es un factor a  $j$ -ésimos vecinos y viene de la consideración de interacción entre qubits dada por la aproximación de Ising (21); por lo general, sólo se toman primeros y segundos vecinos, los demás toman un valor de cero, no obstante, queda a criterio de la investigación (26).

<sup>16</sup> Esta frecuencia se puede entender como la precesión del spin dada la interacción Zeeman (7) .

<sup>17</sup> Se tiene la expresión de esa forma porque al programar no se toma en cuenta  $\hbar$

Una propiedad característica de las interacciones entre las partículas es que éstas están dadas por las reglas de selección, las cuales se generan a través de los elementos de matriz  $\widehat{W}$ , que contiene los operadores  $S_+$  y  $S_-$  y establecen que los estados van a interactuar con otros  $n$  estados <sup>18</sup> y estos van a ser conformados a través de la suma módulo 1 de cada registro (8), esto se puede expresar como

$$\begin{aligned} |\alpha_N, \alpha_{N-1}, \dots, \alpha_1\rangle &\longleftrightarrow |\alpha_N \oplus 1, \alpha_{N-1}, \dots, \alpha_1\rangle, \\ &|\alpha_N, \alpha_{N-1} \oplus 1, \dots, \alpha_1\rangle, \\ &\vdots \\ &|\alpha_N, \alpha_{N-1}, \dots, \alpha_1 \oplus 1\rangle, \end{aligned} \quad [2.27]$$

Donde  $\oplus$  se hace la operación suma módulo 1. Acorde a nuestro sistema, se puede hacer una transición del estado  $i$  al estado  $j$ <sup>19</sup> al asignarle a la frecuencia del campo magnético la diferencia de energías de estos dos estados, siempre y cuando estos puedan interactuar entre ellos mediante las reglas de selección; esto es

$$|i\rangle \longleftrightarrow |j\rangle : \quad \omega = \frac{1}{\hbar} (E_i - E_j) \quad [2.28]$$

Esto da como resultado una transición por resonancia debido a que el C13 tiene un momento magnético característico por tener spin resultante de  $\frac{1}{2}$ . Si el valor de la frecuencia del campo magnético fuese ligeramente diferente a la diferencia de energías que respecto a los estados  $i$  con  $j$ , entonces se observaría transiciones no resonantes<sup>20</sup> o no se observarían transiciones sino excitaciones/ perturbaciones periódicas por cada estado (21). Cabe mencionar que uno de los aspectos más importantes de la dinámica de una computadora cuántica es determinar cómo influyen estas transiciones no resonantes (7).

---

<sup>18</sup>  $n$  sigue siendo el número de qubits

<sup>19</sup> Donde  $i$  es mayor que  $j$

<sup>20</sup> Es decir que comienza a existir una transición

## 2.2 Planeación y seguimiento del proyecto

- Descripción del proyecto

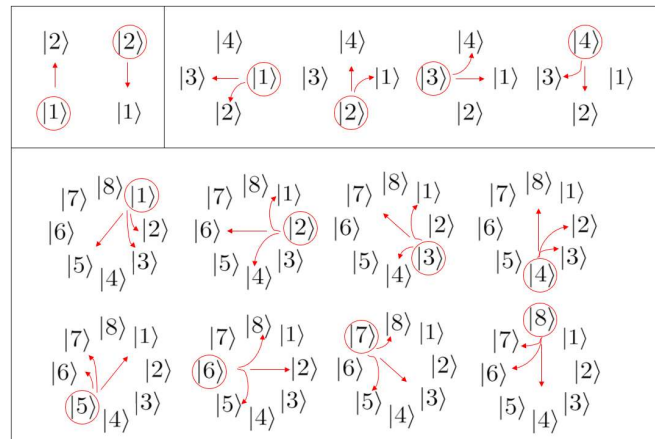
La principal tarea que se realizó en este proyecto fue una generalización de los programas y procedimientos matemáticos para tener el desarrollo necesarios para poder cometer el programa generalizado para  $N$  qubits. Esto se pudo realizar mediante un análisis detallado de los procesos que ocurren al resolver la ecuación de Schrödinger para 1, 2, y 3 qubits y, de esta manera, poder generar rápidamente un programa para 4 qubits y una identificación de los patrones que se estaban mostrando. Para lograr esto se analizó el comportamiento de las ecuaciones diferenciales. Estas se encuentran sujetas a las reglas de selección pertinentes dependiendo de la interacción otorgada por el potencial, por lo que, primeramente, se hizo un análisis de cómo se realizaban las interacciones. Lo que se hizo fue analizar progresivamente como se comportaban los estados. Para esto, se utilizó una nueva notación que seguía una lógica numérica asignada por el número binario que depende del número de qubits. Esta representación se puede observar en la **Figura 4**.

1 Qubit	2 Qubit	3 Qubit
$ 0\rangle \rightarrow  1\rangle$	$ 00\rangle \rightarrow  1\rangle$	$ 000\rangle \rightarrow  1\rangle$
$ 1\rangle \rightarrow  2\rangle$	$ 01\rangle \rightarrow  2\rangle$	$ 001\rangle \rightarrow  2\rangle$
	$ 10\rangle \rightarrow  3\rangle$	$ 010\rangle \rightarrow  3\rangle$
	$ 11\rangle \rightarrow  4\rangle$	$ 011\rangle \rightarrow  4\rangle$
		$ 100\rangle \rightarrow  5\rangle$
		$ 101\rangle \rightarrow  6\rangle$
		$ 110\rangle \rightarrow  7\rangle$
		$ 111\rangle \rightarrow  8\rangle$

**Figura 4.** Notación utilizada para nombrar los estados que hay en cada sistema. Como ya sabemos, el número de estados es  $2^N$ . Se puede observar que el estado que tiene más “ceros” se denota como el estado más bajo y el estado más alto se denota con el mayor número de “unos”. Así mismo, la progresión va aumentando conforme se va recorriendo el uso de números binarios (25).

Esta lógica se puede continuar generando para un número  $N$  de partículas donde el estado que contiene  $N$  ceros es el estado más bajo denotado por “1” y el estado más alto es aquel que contiene  $N$  unos, denotado por el número 2.

Posteriormente a esto, se hizo un análisis de la interacción entre los estados denotado por las reglas de selección del sistema cuántico. Para llevar a cabo esto, se utilizó una visualización de números en distintos módulos. Para un qubit, se hizo el módulo 2, para dos qubits el módulo 4, para tres el módulo 8 y así sucesivamente. Se logró identificar un patrón que regía la interacción entre los estados. Este patrón se puede observar en la **Figura 5**. Este resultado se obtiene a partir de definir el número opuesto del módulo, (dependiendo claramente del módulo en el cuál el estado se encuentre) junto con la construcción de las demás interacciones de estados en algún módulo anterior. Para ejemplificar, el estado 1 interactuaría con el estado 2 para un qubit, posteriormente este interactuaría con los estados 2 y 3, luego con los estados 2, 3, y 5, siendo todos el opuesto en módulo (reflejado en la **Figura 5**) para cada caso.



**Figura 5. Reglas de selección entre estados para uno, dos y tres qubits. Se tiene una representación en módulo donde el círculo denota el estado que se quiere analizar y las flechas los estados con el cual hay una interacción denotada por las reglas de selección. Siempre se cumple la condición que, para una nueva interacción, se toma en cuenta el opuesto en módulo (representado por una línea recta) (25).**



Una vez teniendo las reglas de selección de manera general, se pudo identificar de manera rápida qué estados interactuarían para 4 qubits y por ende se desarrolló el método numérico para realizar la solución de este sistema físico. El método numérico con el cuál se decidió trabajar es Runge-Kutta de cuarto orden, al igual que lo que se había estado haciendo en el PAP I.

Se generó un intervalo  $\Delta t = t_f - t_i$  para el cual se definió un hiperparámetro  $h$  que denota el tamaño de paso, y así mismo recorre dicho intervalo a través del número de iteraciones  $m$  del algoritmo:

$$m = \frac{t_f - t_i}{h} \quad [2.29]$$

En nuestro caso, se buscaron valores del hiperparámetro entre 0.1 a 0.001 teniendo en cuenta que otorgándole los valores más pequeños generan mejores resultados, aunque en su contraparte, hacen que el algoritmo sea más tardado debido a que se deben hacer un mayor número de iteraciones.

El número de ecuaciones diferenciales que se deben de resolver está dado por  $2(2^N)$  debido a que se tienen  $2^N$  estados, pero cada uno de ellos tiene coeficientes complejos; teniendo una parte real y otra imaginaria que tendrán que ser solucionadas por el método numérico. Se está utilizando la misma convención utilizada en el PAP I, dónde la parte real y la parte imaginaria del coeficiente  $i$ -ésimo<sup>21</sup> están dadas por  $X^{(i)}(t)$  y  $Y^{(i)}(t)$  respectivamente. Entonces las ecuaciones que se tendrán que resolver toman la forma de

$$\frac{dX^{(i)}}{dt} = \dot{X}^{(i)}(t, X^{(j)}, Y^{(j)}, \dots, X^{(k)}, Y^{(k)}) \quad [2.30]$$

$$\frac{dY^{(i)}}{dt} = \dot{Y}^{(i)}(t, X^{(j)}, Y^{(j)}, \dots, X^{(k)}, Y^{(k)}) \quad [2.31]$$

---

<sup>21</sup>  $n$  es un entero positivo que va de 1 a  $N$ .

Donde los superíndices están definidos por las reglas de selección. El método de Runge-Kutta utiliza las condiciones iniciales del sistema para calcular distintas constantes denotadas por  $K$  y  $L$  (para las componentes reales e imaginarias respectivamente). Esto ayuda a encontrar una aproximación a las soluciones de todas las ecuaciones dadas por (27):

$$X^{(i)}(t+h) = X^{(i)}(t) + \frac{1}{6} \left( K_1^{(i)} + 2K_2^{(i)} + 2K_3^{(i)} + K_4^{(i)} \right) \quad [2.32]$$

$$Y^{(i)}(t+h) = Y^{(i)}(t) + \frac{1}{6} \left( L_1^{(i)} + 2L_2^{(i)} + 2L_3^{(i)} + L_4^{(i)} \right) \quad [2.33]$$

Estas constantes son calculadas de la siguiente manera:

$$K_1^{(i)} = h\dot{X}^{(i)} \left( t, X^{(j)}, Y^{(j)}, \dots, X^{(k)}, Y^{(k)} \right) \quad [2.34]$$

$$L_1^{(i)} = h\dot{Y}^{(i)} \left( t, X^{(j)}, Y^{(j)}, \dots, X^{(k)}, Y^{(k)} \right) \quad [2.35]$$

$$K_2^{(i)} = h\dot{X}^{(i)} \left( t + \frac{h}{2}, X^{(j)} + \frac{K_1^{(j)}}{2}, Y^{(j)} + \frac{L_1^{(j)}}{2}, \dots, X^{(k)} + \frac{K_1^{(k)}}{2}, Y^{(k)} + \frac{L_1^{(k)}}{2} \right) \quad [2.36]$$

$$L_2^{(i)} = h\dot{Y}^{(i)} \left( t + \frac{h}{2}, X^{(j)} + \frac{K_1^{(j)}}{2}, Y^{(j)} + \frac{L_1^{(j)}}{2}, \dots, X^{(k)} + \frac{K_1^{(k)}}{2}, Y^{(k)} + \frac{L_1^{(k)}}{2} \right) \quad [2.37]$$

$$K_3^{(i)} = h\dot{X}^{(i)} \left( t + \frac{h}{2}, X^{(j)} + \frac{K_2^{(j)}}{2}, Y^{(j)} + \frac{L_2^{(j)}}{2}, \dots, X^{(k)} + \frac{K_2^{(k)}}{2}, Y^{(k)} + \frac{L_2^{(k)}}{2} \right) \quad [2.38]$$

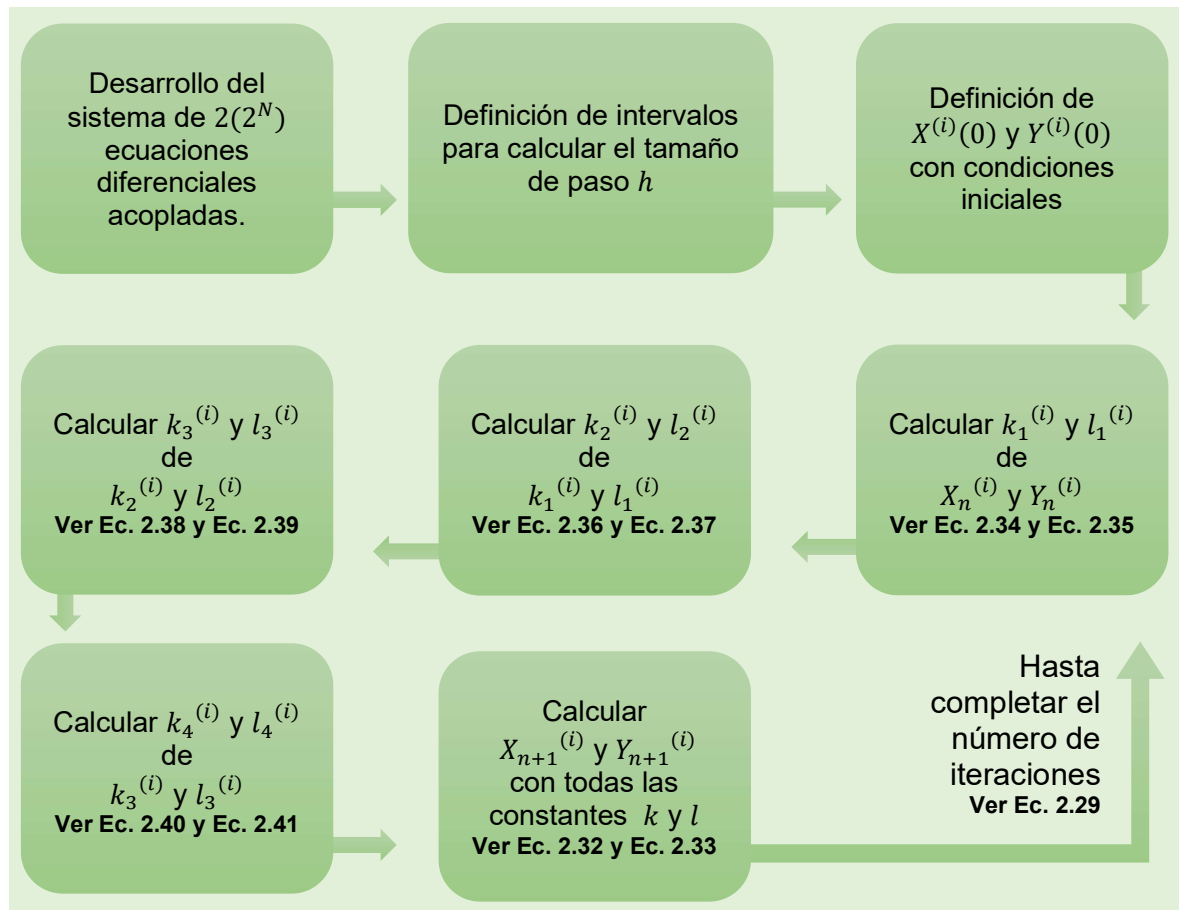
$$L_3^{(i)} = h\dot{Y}^{(i)} \left( t + \frac{h}{2}, X^{(j)} + \frac{K_2^{(j)}}{2}, Y^{(j)} + \frac{L_2^{(j)}}{2}, \dots, X^{(k)} + \frac{K_2^{(k)}}{2}, Y^{(k)} + \frac{L_2^{(k)}}{2} \right) \quad [2.39]$$

$$K_4^{(i)} = h\dot{X}^{(i)} \left( t + h, X^{(j)} + K_3^{(j)}, Y^{(j)} + L_3^{(j)}, \dots, X^{(k)} + K_3^{(k)}, Y^{(k)} + L_3^{(k)} \right) \quad [2.40]$$

$$L_4^{(i)} = h\dot{Y}^{(i)} \left( t + h, X^{(j)} + K_3^{(j)}, Y^{(j)} + L_3^{(j)}, \dots, X^{(k)} + K_3^{(k)}, Y^{(k)} + L_3^{(k)} \right) \quad [2.41]$$

Es importante notar que cada uno de los coeficientes depende de los otros coeficientes pasados.

En la **Figura 6** se muestra el proceso lógico que se siguió para solucionar las ecuaciones emergentes del sistema cuántico para el caso más general.



**Figura 6. Proceso a seguir para utilizar Runge-Kutta de cuarto orden como método numérico para la solución de un sistema de ecuaciones diferenciales (25).**

- Plan de trabajo

En la primera semana se llevaron a cabo las actividades administrativas para garantizar el acceso al centro de investigación dónde trabajaríamos, así como al espacio donde estaríamos desarrollando la investigación. También se realizó el proceso necesario para obtener internet. Debido a que ya conocíamos el estado del

arte, fuimos directamente al desarrollo de las notas en LATEX y nos adentramos a la lectura bibliográfica para tener más presente los conceptos que estaríamos usando.

Posteriormente, se desarrollaron las matemáticas necesarias para generar determinar el comportamiento del sistema cuántico con 4 qubits. Se revisó minuciosamente el procedimiento para identificar posibles errores, y se generó un sistema de ecuaciones diferenciales. Subsiguientemente se procedió a generar el programa en PYTHON para la solución de este sistema y por lo tanto modelar la computadora cuántica para 4 qubits mediante el método numérico de Runge Kutta, siendo el mismo que se utilizó para el PAP I. Al tener el programa completo, se comenzó a realizar la programación en FORTRAN de igual manera para así tener los dos códigos en los lenguajes solicitados.

A la par, se desarrollaron las matemáticas que permitían generalizar las reglas de selección (que determinar la interacción de los estados generados) así como el valor de las energías de estos estados para cualquier número de qubits. Para poder lograr esto se tuvo que visualizar cómo era el comportamiento para 1, 2, 3 y 4 qubits individualmente y encontrar el patrón secuencial a partir de la incorporación paulatina de un mayor número de elementos. Gracias a esto se pudo generar un programa en PYTHON que permitía determinar la diferencia de energías permitidas que generarían un cambio de estados lo cual se puede interpretar de igual manera como las compuertas cuánticas que permiten la viabilidad de computación.

Al desarrollar este código, fue sencillo visualizar gráficamente que había ciertos problemas con la computadora cuántica que estábamos obteniendo, y estos incrementaban conforme se aumentaba el número de qubits. Por lo que se decidió optar por un método de optimización para encontrar parámetros importantes del SF que reducen el número de problemas. Para ello, se pidieron asesorías a distintas personas como al Dr. Juan Diego Sánchez Torres, y al Ing. Rodrigo Hernández

Mota. En la actualidad se sigue desarrollando un método de optimización para reducir el número de problemas (en caso de ser posible).

Utilizando el programa que generaliza para  $N$  qubits, y el programa de 4 qubits, permitió determinar los problemas que tendríamos al intentar manipular los estados cuánticos y por ende se pudo lograr una simulación de Teleportación cuántica sin muchos problemas. Fue entonces cuando se decretó que ciertos parámetros del SC afectaban el número de problemas: mientras la frecuencia de Rabi fuese más pequeña, existía una diferencia más notoria entre las compuertas cuánticas que eran implementadas e indicando que había una existencia de menos problemas. Sin embargo, no se pudo determinar todavía qué era lo que hacía que una frecuencia de Rabi fuese “pequeña”. Solamente se utilizó una (lo suficientemente grande) para abusar de ciertas transiciones no deseadas y lograr efectivamente el algoritmo de Teleportación; no obstante, si se modifica un orden de magnitud la frecuencia de Rabi, el algoritmo dejaría de tener validez.

Mientras se desarrollaban más ideas para abordar este problema, el Dr. Gustavo tuvo una idea de utilizar nuestra simulación para verificar si ciertas modificaciones de nuestro SF podían ser utilizadas para hacer una computadora cuántica más general, por lo que quiso abordar una investigación corta de otro SC basándose en la computadora cuántica. Algunas gráficas acerca de ciertos comportamientos característicos del sistema fueron solicitadas; en específico, fue determinar si la excitación de dos estados conjuntos (cambiar de 00 a 11 para cualesquiera números de qubits mayor a 3) podrían generar una excitación de todos los estados de alguna manera (hacer que todos los estados fuesen activados como 111...).

Consecutivamente, se desarrolló un análisis para la programación en PYTHON de  $N$ -qubits. Para lograr esto se tuvieron que ver como cambiaban los programas pasados que se habían generado y crear los bucles necesarios para crear la generalización. Este programa ya está realizado, pero todavía tiene algunos problemas, así que falta realizar un chequeo minucioso del código para tener

efectivamente el programa que desarrolle la computadora cuántica para cualquier número de qubits. Todo el plan de acción se puede observar de manera gráfica y resumida en la tabla 1. Los colores utilizados hacen referencia a tiempo en días que se utilizaron para llevar a cabo las tareas en la semana donde rojo equivale a un día, amarillo a dos días y verde tres días. Así mismo, se añadieron las actividades proyectadas por hacer hasta la semana 16, este se indica en color verde menta. En la **tabla 2** se indica la simbología de los recursos utilizados para cada actividad.

**Tabla 1. Cronograma de actividades de la semana 1 a la 16.**

Actividades	Recursos	Semanas															
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
<b>Actividades Administrativas</b>																	
Acceso a sala de alumnos	I, LL, DG, SA																
Acceso a Internet																	
<b>Capacitación</b>																	
Lectura bibliográfica	I, DG, SA, IT																
<b>Documentación</b>																	
Notas en LATEX de computación cuántica	I, C, DG, SA, IT																
<b>Actividades de investigación</b>																	
Generación matemática de 4 qubit	I, C, DG, IT, SA																
Programación en PYTHON 4 qubit																	
Programación en FORTRAN 4 qubit.																	
Generación matemática de N qubit																	
Determinación de energía N qubit																	
Programación en PYTHON N qubit.																	
Optimización de programas de energía para N qubits																	
Investigación de otro sistema cuántico																	
Identificación de efectos de los parámetros del sistema cuántico																	
Programación en FORTRAN N qubit.																	
Incorporación de ruido para N qubits.																	

**Continuación Tabla 1. Cronograma de actividades de la semana 1 a la 16**

Actividades	Recursos	Semanas															
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
<b>Simulación</b>																	
Teleportación Cuántica 4 Qubits.	C																
Algoritmo de Búsqueda de Shor. .																	
Algoritmo de factorización de números																	
<b>Otras Actividades</b>																	
Asesorías	JD, RH, IT																

**Tabla 2. Simbología de los recursos utilizados**

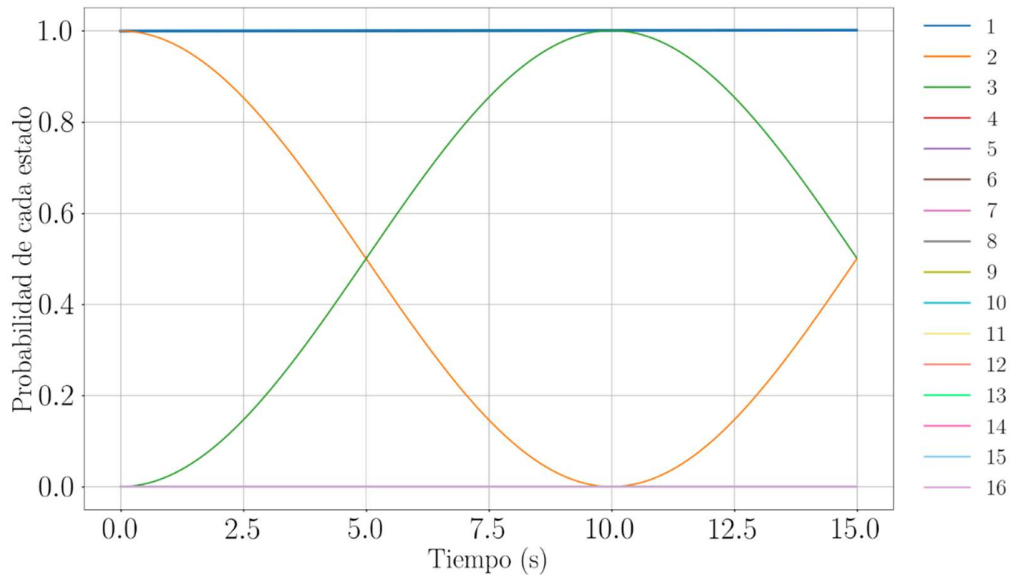
Código	Recurso
I	Internet
LL	Llaves
DG	Dr. Gustavo López Velázquez
JD	Dr. Juan Diego Sánchez
RH	Ing. Rodrigo Hernández Mota
SA	Sala de alumnos
C	Computadora
IT	Instalaciones de ITESO

- Desarrollo de propuesta de mejora

En el PAP I se resolvió el sistema de ecuaciones para 1, 2 y 3 qubits; así como se logró simular fenómenos importantes de la computación cuántica. Mientras que, para la primera mitad de este periodo, se resolvió el sistema de ecuaciones para 4 qubits usando PYTHON y FORTRAN (conservando la misma lógica matemática y método numérico utilizada en el PAP I) y se creó un código en PYTHON que resaltaba las principales propiedades energéticas que presentaba cada sistema dependiendo en el número de partículas, frecuencias de Larmor y frecuencias de Rabi.

Para revisar que los resultados numéricos de los códigos para 4 qubits fueran correctos, se hizo interaccionar a los estados con sus debidos estados de transición asegurando también que la probabilidad total se conservara. La **Figura 7** muestra los resultados de la solución numérica para 4 qubits, simulando una interacción

entre los estados 1 y 2. Sabemos que los resultados son correctos debido a que la probabilidad total se conserva y el comportamiento es lo esperado.



**Figura 7. Solución numérica para 4 qubits, intercambio de probabilidades del estado 1 con el estado 2.**

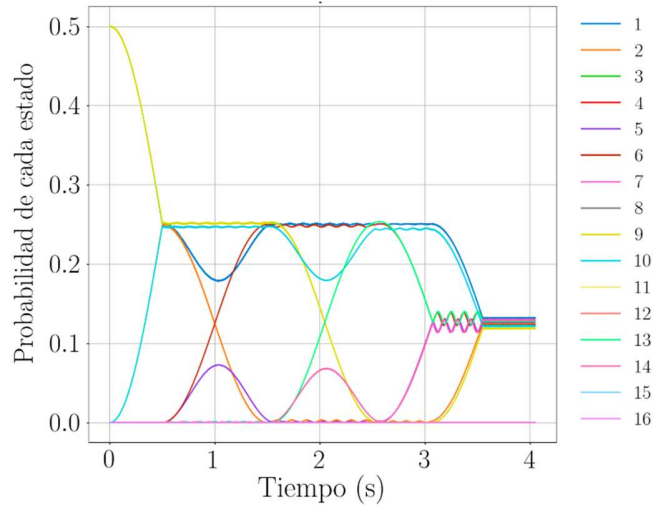
Es importante mencionar que, a diferencia de los códigos que se trabajaron en el PAP I, en el código de 4 qubits fue notable que un tamaño de paso para el hiperparámetro  $h$  mayor que 0.001 cargaba serios porcentajes de error en la solución numérica, haciendo que la probabilidad total fuese mayor que uno. Creemos que este error se debe principalmente a la naturaleza del incremento de ecuaciones por agregar una partícula más, haciendo mayor la complejidad del problema, ya que por cada partícula que se agregue, el número de ecuaciones diferenciales que componen al sistema va a aumentar exponencialmente al doble, obligando que cada vez se requiera de un tamaño de paso  $h$  cada vez más fino para evitar cargar un error del método numérico.

Después de revisar el código de 4 qubits, se prosiguió a simular el fenómeno de teleportación cuántica. La **Figura 8** muestra el diagrama de compuertas lógicas que son necesarias para realizar el fenómeno.



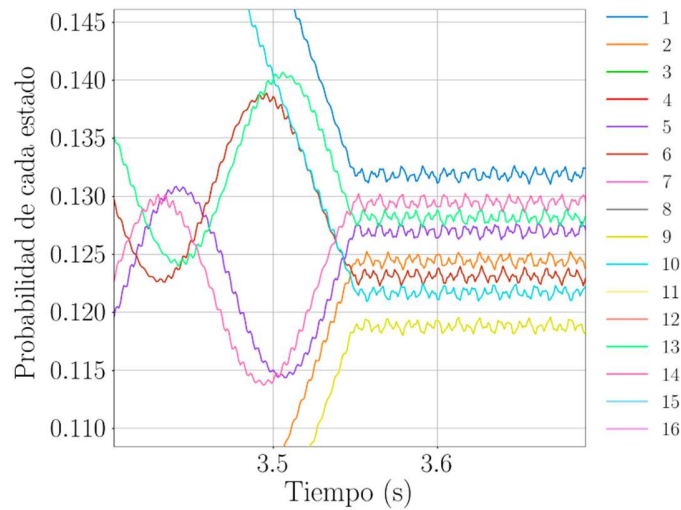

$$|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad [2.37]$$
$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad [2.38]$$
$$|\varphi\rangle = \frac{\alpha}{2} (|0000\rangle + |1000\rangle + |0101\rangle + |1101\rangle) + \frac{\beta}{2} (|0100\rangle + |0001\rangle - |1100\rangle - |1001\rangle) \quad [2.39]$$
$$|\varphi\rangle = \frac{\alpha}{2} (|1\rangle + |9\rangle + |6\rangle + |14\rangle) + \frac{\beta}{2} (|5\rangle + |2\rangle - |13\rangle - |10\rangle) \quad [2.40]$$

32



**Figura 9. Fenómeno de teleportación cuántica para 4 qubits con  $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$ .**

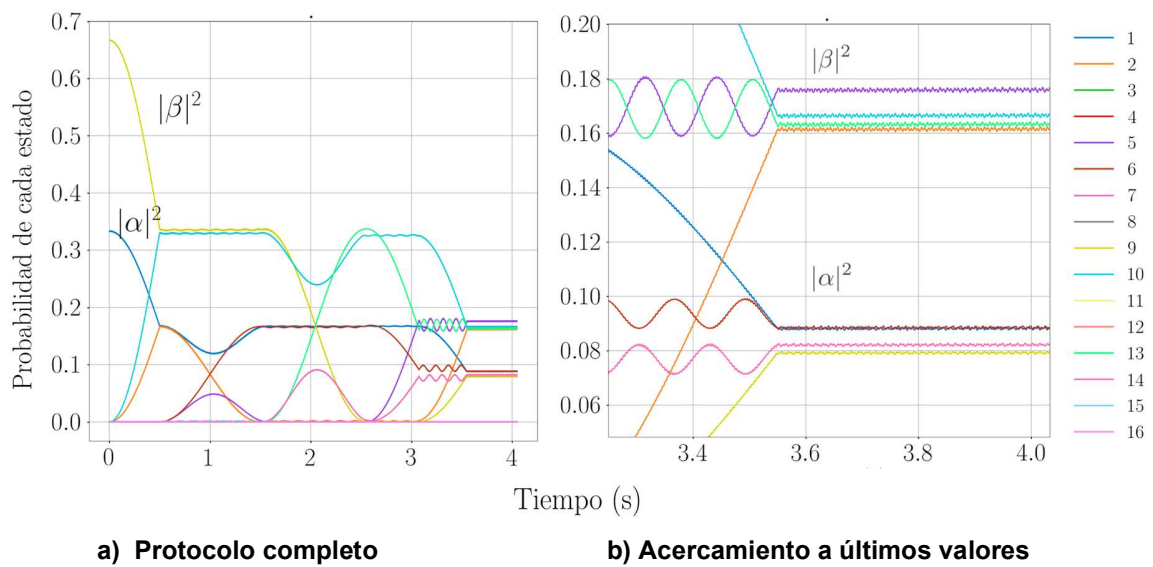
Note que puede ser un poco confuso interpretar de forma *correcta* a la gráfica debido a que hay funciones que están sobrepuestas. La **Figura 10** muestra un acercamiento en la sección de la gráfica donde convergen todos los estados que deberían quedar activos y cercanos un valor de probabilidad aproximado a 0.125.



**Figura 10. Acercamiento del fenómeno de teleportación cuántica al final del algoritmo para 4 qubits con  $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$  mostrando la convergencia de los estados en los valores de probabilidad esperados.**

El segundo 3.55 representa el momento en el que se apagaría el campo magnético y quedaría el fenómeno de teleportación cuántica realizado. Las oscilaciones que quedan se pueden reducir al reducir el tamaño de paso  $h$ ; no obstante, hacer eso causaría que el código se demore mucho tiempo en correr, ya que le tomaría más tiempo formar los datos para la solución a las 32 ecuaciones diferenciales de los 16 estados.

Posteriormente, se hizo el caso donde  $\alpha = \sqrt{1/3}$  y  $\beta = \sqrt{2/3}$ , con el objetivo de poder apreciar mejor el comportamiento del código. La **Figura 11** muestra los resultados numéricos para dicho caso.

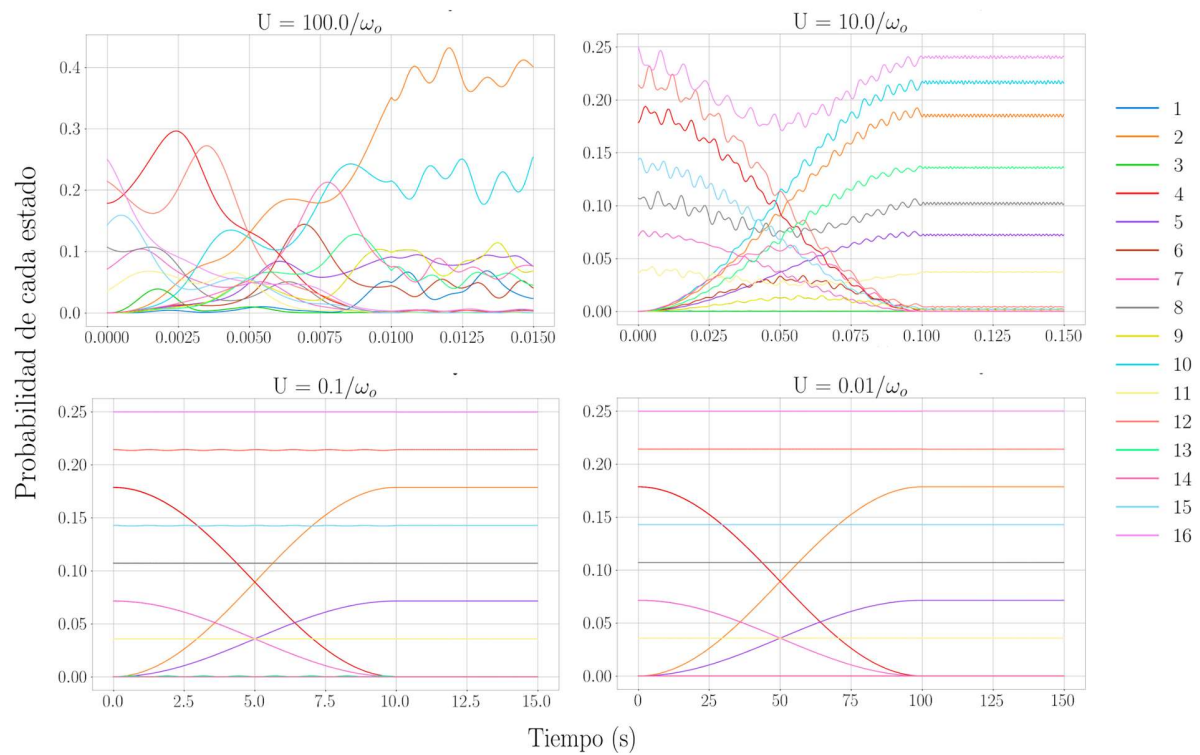


**Figura 11. Fenómeno de teleportación cuántica para 4 qubits con  $\alpha = \sqrt{1/3}$  y  $\beta = \sqrt{2/3}$ .**

Al comparar la **Figura 11a** con la **Figura 9**, es posible notar que el valor inicial que se le da a cada estado va a afectar la interacción de oscilaciones durante el proceso; no obstante, el valor esperado del protocolo se cumple (siempre y cuando se cumpla la restricción de que la suma de ambas probabilidades se debe conservar en 1). La **Figura 11b** exhibe que no todos los valores convergen exactamente en el valor esperado; sin embargo, el porcentaje de error es menor al 1%.

Es importante mencionar que la simulación se hizo con una frecuencia de Rabi igual a  $\pi$ . Si cambiamos el valor de la frecuencia de Rabi, ya sea a órdenes de magnitud mayores o menores, el desempeño de la computadora cuántica comienza a alterarse y los resultados se toman porcentajes de error no aceptables.

Para poder entender mejor cómo es que el valor de la frecuencia de Rabi afecta al desempeño del sistema físico como computadora cuántica, se tomó el código de 4 qubits, y se hicieron interactuar varios estados entre sí. La **Figura 12** muestra cómo son los resultados entre transiciones al variar la frecuencia de Rabi<sup>22</sup>.



**Figura 12. Resultados de transiciones no resonantes entre los estados causados al variar el valor de la frecuencia de Rabi, donde  $\omega_0 = 1/\pi$ .**

<sup>22</sup> En nuestros códigos, tenemos a la frecuencia de Rabi como  $U$ .  
FO-DGA-CPAP-0017

De aquí, podemos inferir que una frecuencia de Rabi más chica hará que la transición entre estados sea más *limpia*. No obstante, mientras más pequeña sea la frecuencia de Rabi, más tiempo le va a tomar al programa terminar de calcular la solución al sistema de ecuaciones. Por otra parte, una frecuencia de Rabi hace que cada compuerta dure más tiempo, haciendo que, en el sistema real, conlleve a fenómenos de decoherencia<sup>23</sup> a la hora de hacer el proceso de medición (28).

Por otra parte, otro código que se trabajó fue el desarrollo de las energías de cada estado, así como las reglas de selección. Para llegar a esto, primero se hizo un código para asignarle un valor numérico a cada estado, tal y como se muestra en la **Figura 4**. Este código se puede ver en la **Figura 13**.

```
#TODOS LOS ESTADOS POSIBLES
def allstates(N):
    k = [ x for x in range(2**N) ]
    k[0] = np.arange(1)
    k[1] = np.arange(1,2)
    m = 1
    while m < N:
        for l in range(2**m):
            k[2**m + l] = np.concatenate(( np.arange(1), k[l] ))
            k[2**m + l][0] = 1
            k[l] = np.concatenate(( np.arange(1), k[l] ))
        m += 1
    return [ list(x) for x in k ]
```

**Figura 13.** Código en PYTHON para asignarle un valor numérico a cada estado dependiendo del número de qubits (25).

Posteriormente también se desarrolló un código para poder identificar las reglas de selección, este se puede observar en la **Figura 14**.

<sup>23</sup> El sistema cuántico pierde sus propiedades como sistema cuántico y se comporta más como sistema clásico, aumentando así el porcentaje de error en cálculos.

Con estos dos códigos será más sencillo realizar un análisis acerca de cuáles son las frecuencias de resonancia para determinar si algunas son parecidas y por ende los problemas intrínsecos que tiene la computadora cuántica.

```
#REGLAS DE SELECCIÓN
def rules(numqubits):
    reglas = [ [] for i in range(2**numqubits) ]
    for b in range(numqubits):
        c = b + 1
        for a in range(2**(c)):
            if a < 2**c/2:
                reglas[a].append(int( (a + 1 + 2**(c-1))%(2**c) ))
                if reglas[a][b] == 0:
                    reglas[a][b] = 2**c
            elif a >= 2**(c-1):
                for i in range(len(reglas[ int( a-2**(c-1) ) ])):
                    reglas[a].append( int( ( reglas[int( a-2**(c-1) )][i] + \
                        2**(c-1))%(2**c) ))
                    if reglas[a][i] == 0:
                        reglas[a][i] = 2**c
    reglas = [sorted(x) for x in reglas]
    return reglas
```

**Figura 14.** Código en PYTHON para determinar las reglas de selección entre estados (25).

### 3. Resultados del trabajo profesional

A comparación del PAP I, no se logró la realización de todos los códigos y análisis presentados en la **Tabla 1**. No obstante, no sólo se programó para un sistema de cuatro qubits que simulaba diversas compuertas lógicas y algoritmos importantes de la computación cuántica (mostrado en las **Figuras 9, 10 y 11**), sino que también se pudo obtener un código general para  $N$  número de qubits, en PYTHON, y se trabajó en la constante mejora de un código que revela propiedades características intrínsecas del sistema que podría responder a la pregunta de si el sistema es apto para ser utilizado como computadora cuántica o no; de ser la respuesta positiva, entonces, poder determinar los límites de éste bajo la consideración de sistema ideal. Es por ello que, en lugar de analizar los resultados numéricos de una simulación de sistema con ruido, se trabajó en la redacción de los resultados del código de análisis de las energías; con el objetivo de que dicha redacción sea publicable como artículo científico. Por otra parte, se siguió con el escrito que trata la introducción a la computación cuántica y el ejemplo al sistema físico que hemos trabajado en todo el PAP; con el objetivo de que dicho texto sea publicado como libro.

Para generar los códigos de  $N$  qubits y el que da información intrínseca del sistema cuántico; fue necesario retomar las líneas de código mostradas en la **Figura 13** y **Figura 14**. A comparación de los otros códigos desarrollados en el PAP I y el de 4 qubits; estos dos códigos se trabajaron en la plataforma de JUPYTER, ya que de esa forma era más fácil redactar y visualizar la información; luego, para las gráficas y visualización de datos, se utilizó el sistema operativo *Ubuntu*, ya que este da más libertad de modificación de parámetros que en JUPYTER. Respecto al código de  $N$  qubits, este se puede consultar en el **Anexo 1**.

El resultado del código para  $N$  qubits funciona determinar un número fijo  $N = C$ . Por lo que básicamente es una generalización de código para cualquier número de qubits.

Este programa se llevó a cabo debido a que se incluyó una expresión generalizada de las ecuaciones diferenciales (que se obtienen a partir del sistema físico) dentro

del código obtenido de Runge Kutta. Para obtener esto, se tuvo que desarrollar la matemática adecuada por inferencia de los 4 códigos anteriores. Se pudo obtener una expresión generalizada de las ecuaciones diferenciales las cuales se dividen en dos casos específicos.

El primer caso denota un valor de índice de estado menor al número de regla de selección correspondiente, es decir, para un valor de  $k < r_{k,j}$ .

$$\dot{X}_k = \frac{\Omega}{2} \sum_{j=1}^N (-X_{(r_{k,j})} \sin(\beta_{k,(r_{k,j})}) - Y_{(r_{k,j})} \cos(\beta_{k,(r_{k,j})})) \quad [3.1]$$

$$\dot{Y}_k = \frac{\Omega}{2} \sum_{j=1}^N (X_{(r_{k,j})} \cos(\beta_{k,(r_{k,j})}) - Y_{(r_{k,j})} \sin(\beta_{k,(r_{k,j})})) \quad [3.2]$$

Para el segundo caso se denota un valor del índice del estado a analizar mayor al número de índice identificado por la regla de selección,  $k > r_{k,j}$ .

$$\dot{X}_k = \frac{\Omega}{2} \sum_{j=1}^N (X_{(r_{k,j})} \sin(\beta_{(r_{k,j}),k}) - Y_{(r_{k,j})} \cos(\beta_{(r_{k,j}),k})) \quad [3.3]$$

$$\dot{Y}_k = \frac{\Omega}{2} \sum_{j=1}^N (X_{(r_{k,j})} \cos(\beta_{k,(r_{k,j})}) + Y_{(r_{k,j})} \sin(\beta_{(r_{k,j}),k})) \quad [3.4]$$

En estas ecuaciones,  $k$  denota el subíndice de la ecuación diferencial asociado al estado cuántico de éste mismo índice y  $r_{k,j}$  hace referencia a la posición “ $j$ ” de un vector generado de que indica las reglas de selección correspondiente con el estado  $k$  (este vector se obtiene corriendo el código observado en la **Figura 14**). La **Figura 15** y **16** se muestra el código donde se observa la integración de Runge Kutta con las ecuaciones diferenciales obtenidas.



```

#REGLAS DE SELECCIÓN
def rules(numqubits):
    reglas = [ [] for i in range(2**numqubits) ]
    for b in range(numqubits):
        c = b + 1
        for a in range(2**(c)):
            if a < 2**c/2:
                reglas[a].append(int( (a + 1 + 2**(c-1) )%(2**c) ))
                if reglas[a][b] == 0:
                    reglas[a][b] = 2**c
            elif a >= 2**(c-1):
                for i in range(len(reglas[ int( a-2**(c-1) ) ])):
                    reglas[a].append( int( ( reglas[int( a-2**(c-1) )][i] + \
                        2**(c-1))%(2**c) ))
                    if reglas[a][i] == 0:
                        reglas[a][i] = 2**c
    reglas = [sorted(x) for x in reglas]
    return reglas

```

**Figura 15. Código en PYTHON para el método numérico Runge Kutta con la ecuación diferencial integrada (25).**

```

#ECUACIONES DIFERENCIALES CON RUNGE KUTTA
def differential_equation_x_y(t,x,y,r,pos,contador,contKL):
    global U, K, L, h, cuenta
    if contKL == 1:
        ALPHA = 0
    elif (contKL == 2) or (contKL == 3):
        ALPHA=.5
    elif contKL == 4:
        ALPHA = 1
    else:
        ALPHA=0

    t=t+h*ALPHA

    sumax=[]
    sumay=[]
    for i in range(len(r)):
        if pos<r[i]:
            A1=1
            B1=B(t,pos,r[i])
        elif pos>r[i]:
            A1=0
            B1=B(t,r[i],pos)
        sumax.append(U*.5*((-1)**(A1)*sin(B1)*(x[r[i]-1][contador] + ALPHA*K[contKL-1][r[i]-1]) - \
            cos(B1)*(y[r[i]-1][contador] + ALPHA*L[contKL-1][r[i]-1])))
        sumay.append(U*.5*(cos(B1)*(x[r[i]-1][contador] + ALPHA*K[contKL-1][r[i]-1]) + \
            (-1)**(A1)*sin(B1)*(y[r[i]-1][contador] + ALPHA*L[contKL-1][r[i]-1])))
        cuenta=cuenta+1
    return sum(sumax),sum(sumay)

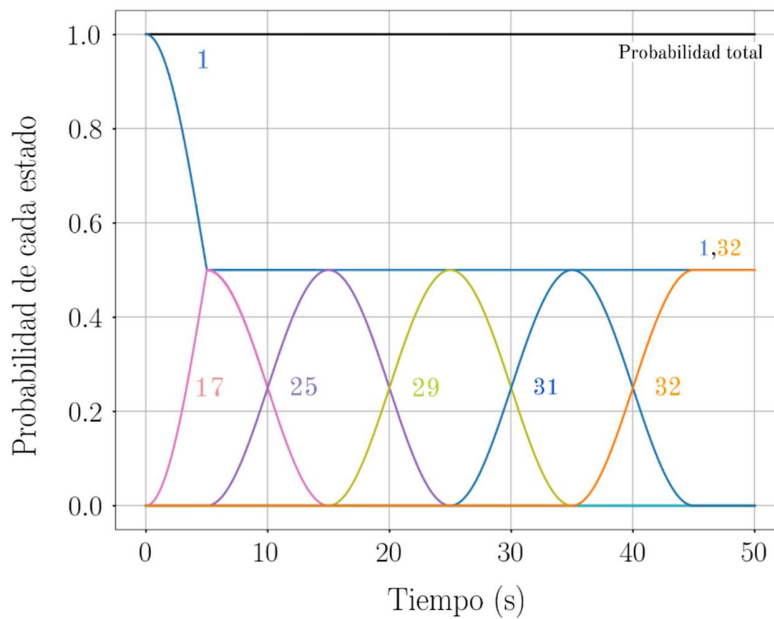
```

**Figura 16. Código en PYTHON para acoplar Runge Kutta y las ecuaciones diferenciales obtenidas (25).**

Una vez obtenido esto, se implementó el algoritmo cuántico para generar un estado en particular (este se puede encontrar en el **Anexo 1**). En específico, para un número determinado de qubits  $N = 5$ , se desarrolló el estado Greenberger-Horne-Zeilinger<sup>24</sup> para corroborar su funcionamiento correcto. El cual tiene la forma de

$$|\text{GHZ}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|00000\rangle + |11111\rangle) \quad [3.5]$$

Estos dos estados cuánticos, en notación decimal, pertenecen al estado 1 y al estado 32. Al igual que en las demás simulaciones, para los resultados de este código, se utilizó la suma de todas las probabilidades como parámetro de confiabilidad en los datos numéricos. Por lo que, sabemos que la simulación es correcta porque la probabilidad total se conserva y el comportamiento es el esperado. La **Figura 17** muestra el resultado obtenido de esta simulación.



**Figura 17. Resultado del código de  $N=5$  qubits simulando el estado cuántico de Greenberger-Horne-Zeilinger, el cual empieza con el estado base puro y termina con una superposición del estado base y el estado de mayor energía. Los números representan el estado al que la línea pertenece; los otros estados no forman parte del proceso.**

<sup>24</sup> Este estado tiene un interés particular en la teoría de la información cuántica, pero sale del alcance de este proyecto.

Aunado esto, surgió la hipótesis de determinar cómo es que las frecuencias de Larmor modifican el comportamiento de las compuertas lógicas del sistema debido a que se tenían problemas intrínsecos que no permitían desarrollar algoritmos de manera efectiva. Por esta razón, se generaron los códigos correspondientes para poder hacer un análisis de las energías que se obtienen al definir un valor fijo de  $N$  qubits.

Como es sabido, al tener  $N$  partículas, se tienen  $2^N$  estados que tienen una energía asociada determinada por la ecuación (2.26). Donde, para poder hacer una transición de estados completa, se necesitan cumplir tres requisitos.

El primer requisito, es asegurarse que los estados cumplan con las reglas de selección pertinentes determinadas. El segundo es que se aplique una frecuencia del campo magnético igual a la diferencia de energía entre los estados correspondientes.

$$|i\rangle \longleftrightarrow |j\rangle : \quad \omega = \frac{1}{\hbar} (E_j - E_i) \quad [3.6]$$

Por último, el tercer requisito es que el campo magnético se aplique durante un tiempo determinado dado por el parámetro de la frecuencia de Rabi  $\Omega$ , estos se conocen como pulsos. Una transición completa de las probabilidades de estados está dada por el tiempo del campo magnético activado durante un  $\pi$  –pulso, es decir, cuando el tiempo:

$$\tau = \frac{\pi}{\Omega} \quad [3.7]$$

No obstante, también es posible tener transiciones de estados no completas dependiendo del tiempo que son aplicadas. Un ejemplo de esto podría ser un  $\pi/2$  –pulso. Este pulso pone en superposición de misma probabilidad a dos estados cuánticos distintos.

$$\tau = \frac{\pi}{2\Omega} \quad [3.8]$$

De estas tres condiciones que existen para hacer la transición de estados, los dos primeros generan una restricción para el número de transiciones entre estados que se pueden realizar, obteniendo un número total de  $N2^{N-1}$ . Es importante dictaminar que debido a que las energías dependen de las frecuencias de Larmor y de las constantes de acoplamiento  $J$  y  $J'$ , también lo hacen las diferencias de energías. Con esta información, se obtendrá un valor dominante que tiene el valor numérico de una frecuencia de Larmor específica otorgada para ciertas transiciones. Esto hace que algunos valores obtenidos para hacer transiciones de diferencias de energía queden aglomerados en una vecindad.

En total se desarrollan  $N$  vecindades  $B_i(\omega_i, R_i)$  que dependen de cada frecuencia de Larmor y un radio definido <sup>25</sup>por una combinación de las constantes de acoplamiento  $J$  y  $J'$ . Definir las vecindades es útil debido a que se pueden ver los valores de campo magnético necesarios para generar una transición; al llegar a ser similares, se puede complicar el funcionamiento correcto de las compuertas debido a que existe una degeneración de los valores de transición dando paso a transiciones no resonantes. De manera formal podemos definir cada vecindad como:

$$\forall \omega_i \exists B(\omega_i, r_i) \text{ donde } B_i \text{ está separada de } B_j \text{ si } \forall i, j; i \neq j \mid \exists \omega_i, \omega_j: B_i \cap B_j = 0 \quad [3.9]$$

Para el caso general, en cada vecindad se encuentran  $2^{N-1}$  diferencias de energía para generar transiciones que tienen valores muy semejantes (solo varían por el factor  $J$  y  $J'$ ).

Es posible identificar cada vecindad por tener ciertas transiciones energéticas relacionadas al registro de qubit que se modifica al hacer una transición. Para ilustrar esto, en la **Figura 18** se muestran todas las transiciones posibles que pertenecen a la vecindad  $B_N(\omega_N, R^*)$ .

---

<sup>25</sup> Falta todavía encontrar una fórmula para determinar el radio de cada vecindad.  
FO-DGA-CPAP-0017

$$\begin{array}{ccc}
|100 \dots 000\rangle & \longleftrightarrow & |000 \dots 000\rangle \\
|100 \dots 001\rangle & \longleftrightarrow & |000 \dots 001\rangle \\
& \vdots & \\
|111 \dots 110\rangle & \longleftrightarrow & |011 \dots 110\rangle \\
|111 \dots 111\rangle & \longleftrightarrow & |011 \dots 111\rangle
\end{array}$$

**Figura 18. Transiciones de estados pertenecientes a la vecindad  $B_N$ . En términos matemáticos:  $\alpha_N \rightarrow \alpha_N \oplus 1$ . Esta vecindad se caracteriza debido a que el valor del campo magnético necesario para generar la transición es aproximadamente la frecuencia de Larmor del  $N$ -esimo qubit  $\omega_N$  (25).**

Para poder entender de manera práctica, se propone un ejemplo ilustrativo en la **Figura 19**. Fijando un número de qubits  $N = 4$  y asociando una frecuencia de Larmor a cada qubit; como resultado, habrá 16 estados con un total de 32 transiciones permitidas entre ellos.

$B_4 (\omega_4, R_4^*)$	$B_3 (\omega_3, R_3^*)$	$B_2 (\omega_2, R_2^*)$	$B_1 (\omega_1, R_1^*)$
$ 1000\rangle \leftrightarrow  0000\rangle$	$ 0100\rangle \leftrightarrow  0000\rangle$	$ 0011\rangle \leftrightarrow  0000\rangle$	$ 0001\rangle \leftrightarrow  0000\rangle$
$ 1001\rangle \leftrightarrow  0001\rangle$	$ 0101\rangle \leftrightarrow  0001\rangle$	$ 0111\rangle \leftrightarrow  0001\rangle$	$ 0011\rangle \leftrightarrow  0010\rangle$
$ 1010\rangle \leftrightarrow  0010\rangle$	$ 0110\rangle \leftrightarrow  0010\rangle$	$ 1011\rangle \leftrightarrow  0100\rangle$	$ 0101\rangle \leftrightarrow  0100\rangle$
$ 1011\rangle \leftrightarrow  0011\rangle$	$ 0111\rangle \leftrightarrow  0011\rangle$	$ 1111\rangle \leftrightarrow  0101\rangle$	$ 0111\rangle \leftrightarrow  0110\rangle$
$ 1100\rangle \leftrightarrow  0100\rangle$	$ 1100\rangle \leftrightarrow  1000\rangle$	$ 0011\rangle \leftrightarrow  1000\rangle$	$ 1001\rangle \leftrightarrow  1000\rangle$
$ 1101\rangle \leftrightarrow  0101\rangle$	$ 1111\rangle \leftrightarrow  1001\rangle$	$ 0111\rangle \leftrightarrow  1001\rangle$	$ 1011\rangle \leftrightarrow  1010\rangle$
$ 1110\rangle \leftrightarrow  0110\rangle$	$ 1110\rangle \leftrightarrow  1010\rangle$	$ 1011\rangle \leftrightarrow  1100\rangle$	$ 1101\rangle \leftrightarrow  1100\rangle$
$ 1111\rangle \leftrightarrow  0111\rangle$	$ 1111\rangle \leftrightarrow  1011\rangle$	$ 1111\rangle \leftrightarrow  1101\rangle$	$ 1111\rangle \leftrightarrow  1110\rangle$

**Figura 19. Transiciones de estados permitidos para 4 qubits, cada transición pertenece a una vecindad que tiene asociada una frecuencia de Larmor. Se puede ver que, para cada vecindad, su registro correspondiente de qubit hace un cambio de 1 a 0 o viceversa (25).**

Se obtuvo que cada vecindad tiene un radio determinado, dependiendo del número de qubits que se analicen de una manera analítica y numérica. El radio representa

el valor máximo (y mínimo con un signo negativo) de diferencias de energía pertenecientes a su propia vecindad respecto al valor central.

Vale la pena hacer el análisis desde 3 qubits debido a que en este punto comienza a haber interacción entre primeros y segundos vecinos. Se realizaron los cálculos numéricos y analíticos para corroborar el valor de los radios para 3, 5 y 6 qubits; para 6 y 7 se hicieron solamente de manera numérica pero se extrapolaron a la representación analítica. En la **Figura 20** se presentan las expresiones analíticas de los radios para 3, 4, 5, 6, y 7 qubits.

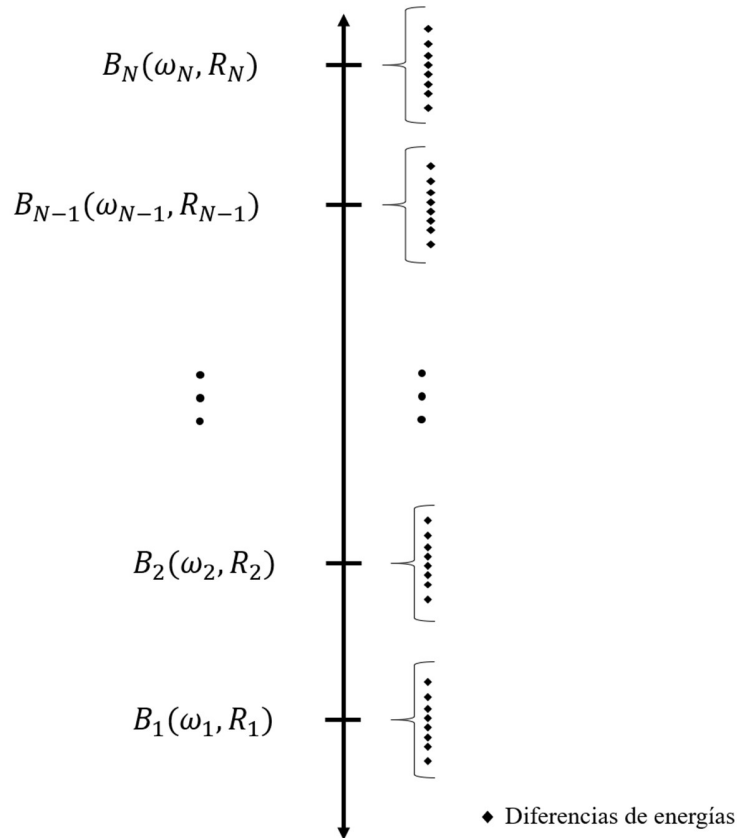
3 Qubits		4 Qubits		5 Qubits		6 Qubits		7 Qubits	
Vecindad	Radio	Vecindad	Radio	Vecindad	Radio	Vecindad	Radio	Vecindad	Radio
B <sub>1</sub>	$\frac{J+J'}{2}$	B <sub>1</sub>	$\frac{J+J'}{2}$	B <sub>1</sub>	$\frac{J+J'}{2}$	B <sub>1</sub>	$\frac{J+J'}{2}$	B <sub>1</sub>	$\frac{J+J'}{2}$
B <sub>2</sub>	$J$	B <sub>2</sub>	$J + \frac{J'}{2}$	B <sub>2</sub>	$J + \frac{J'}{2}$	B <sub>2</sub>	$J + \frac{J'}{2}$	B <sub>2</sub>	$J + \frac{J'}{2}$
B <sub>3</sub>	$\frac{J+J'}{2}$	B <sub>3</sub>	$J + \frac{J'}{2}$	B <sub>3</sub>	$J + J'$	B <sub>3</sub>	$J + J'$	B <sub>3</sub>	$J + J'$
		B <sub>4</sub>	$\frac{J+J'}{2}$	B <sub>4</sub>	$J + \frac{J'}{2}$	B <sub>4</sub>	$J + J'$	B <sub>4</sub>	$J + J'$
				B <sub>5</sub>	$\frac{J+J'}{2}$	B <sub>5</sub>	$J + \frac{J'}{2}$	B <sub>5</sub>	$J + J'$
						B <sub>6</sub>	$\frac{J+J'}{2}$	B <sub>6</sub>	$J + \frac{J'}{2}$
								B <sub>7</sub>	$\frac{J+J'}{2}$

**Figura 20. Expresiones analíticas del radio de la vecindad para un número definido de qubits. Es posible notar un patrón de simetría central de reflexión; también vale la pena recalcar que para el caso de 7 qubits, los radios centrales están dados por la expresión  $J + J'$ , se puede especular que los siguientes qubits tendrán radios interiores que seguirán cumpliendo con esa regla (25) .**

Se puede hacer una representación de cada vecindad debido a que son las agrupaciones generales que se esperaría obtener para un número de qubits arbitrario, esta se puede observar en la **Figura 21**.

Es importante denotar que mientras el número de qubits incrementa, los radios como tal, no se ven modificados, es decir que siempre mantendrán esos valores para las vecindades ubicadas en los extremos y las vecindades centrales. Esto indica que habrá un gran número de diferencias de energía con valores similares acotados en los radios, haciendo difícil el diferenciar entre ellos mismos de manera práctica y por ende impidiendo tener compuertas bien definidas causando

problemas intrínsecos de la computadora cuántica, desde transiciones no resonantes hasta transiciones no deseadas<sup>26</sup>. Por lo tanto, el valor que se agrega al definir las vecindades es que da un poder predictivo que a un número grande de qubits, los valores se aglomeran dentro de las mismas vecindades haciendo que sea más difícil diferenciar entre cada diferencia de energía y, por ende, entre cada compuerta.

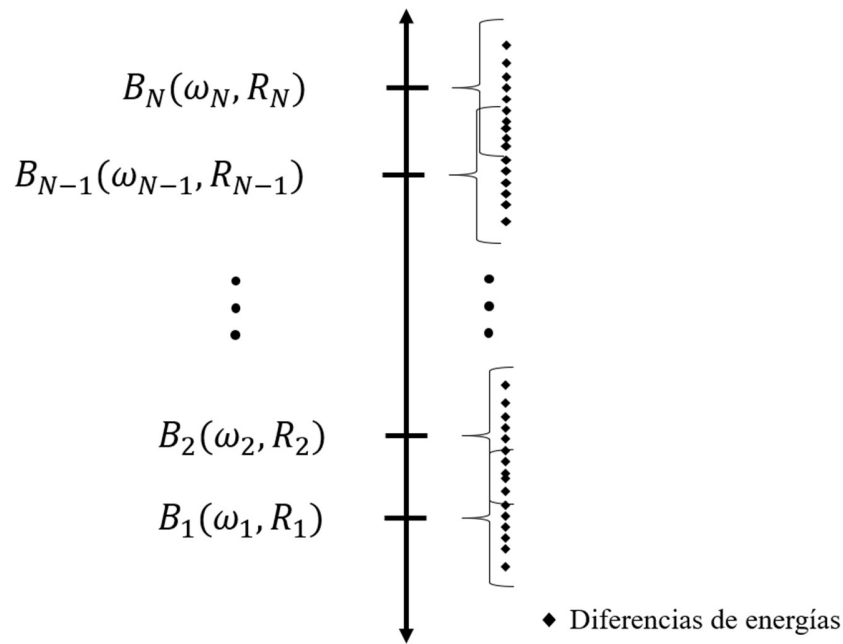


**Figura 21. Representación gráfica de las  $N$  vecindades del sistema cuántico analizado. Cada vecindad tiene un radio que la define, así como una frecuencia de Larmor correspondiente que la ubica (25).**

No obstante, como es de esperarse en el comportamiento, es importante definir de manera correcta las frecuencias de Larmor correspondientes debido a que sin que

<sup>26</sup> Esto se podría modificar al obtener un valor más grande de la constante de acoplamiento debido a que la diferenciación se genera por este valor. Implicando que inclusive pueda haber mayor interacción con vecinos.

haya necesidad de que existiese una gran cantidad de qubits, las vecindades se pueden sobreponer, haciendo que algunas transiciones energéticas tengan valores similares; causando mayor degeneración en los valores energéticos de las transiciones; generando errores de transiciones no resonantes o no deseadas. Esto se puede ver de manera gráfica en la **Figura 22**.



**Figura 22. Sobreposición de las vecindades por una mala elección de las frecuencias de Larmor (25).**

Para poder determinar las similitudes entre cada valor de transición de estados (o diferencia de energía), lo que se realizó fue hacer la diferencia de estas transiciones. Y posteriormente realizar todas las comparaciones a pares necesarias y así comprobar su diferenciabilidad. Entre mayor sea el valor de la diferencia, menos similares serían; si el valor de la diferencia es cero quiere decir que son iguales.



Para ilustrar cómo los valores de la frecuencia de Larmor de cada qubit afectan el desempeño de la computadora cuántica, se hicieron simulaciones que analizaban la asignación de valores de forma equidistante y uniforme a partir de la relación:

$$\omega_i = k + \zeta(i - 1) \quad [3.10]$$

Donde  $\zeta$  toma tres valores:  $\zeta = 0$ ,  $\zeta = 5$  y  $\zeta = 50$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots, N$  y  $k = 100$ .

En  $\zeta = 0$ , no hay variación entre los valores de las frecuencias,  $\zeta = 5$  da una variación mínima entre los valores de las frecuencias (de la misma magnitud que la constante de acoplamiento  $J$ ) y con  $\zeta = 50$  la variación entre valores es considerable (una orden de magnitud mayor a  $J$ )<sup>27</sup>.

Como ya se sabe, es necesario contar con las diferencias de energías para poder hacer una transición de estados. Por lo que, para conocer cómo cada vecindad afecta la transición entre estados, se calculó la diferencia de diferencia de energías como

$$\Delta_{kj}^{ml} = |\omega_{ml} - \omega_{kj}| \quad [3.11]$$

donde,

$$\omega_{kj} = \frac{1}{\hbar} (E_k - E_j) \quad [3.12]$$

para todas las transiciones válidas  $m$  con  $l$ , o  $k$  con  $j$ ; dado un número de  $N$  qubits.

Mientras el valor de las diferencias de diferencias de energías se aproxime o sea igual a cero, esto significa que va a haber transiciones no resonantes o inclusive transiciones resonantes no deseadas. Como consecuencia, el desempeño del sistema físico como computadora cuántica decrece.

---

<sup>27</sup> Este valor no tiene unidades debido a que está normalizado a una frecuencia de oscilación de 1Hz; por lo que se puede hacer el análisis adimensional.

Para los resultados, el código se encarga de clasificar los valores de  $\Delta_{kj}^{ml}$  en cinco grupos: A, B, C, D y E. La **Figura 23** muestra sus dominios.

Grupo A:	$0 \leq \Delta_{kj}^{ml} < \frac{J'}{2}$
Grupo B:	$\frac{J'}{2} \leq \Delta_{kj}^{ml} < \frac{J}{2}$
Grupo C:	$\frac{J}{2} \leq \Delta_{kj}^{ml} < \frac{3J}{2}$
Grupo D:	$\frac{3J}{2} \leq \Delta_{kj}^{ml} < 3J$
Grupo E:	$\Delta_{kj}^{ml} \geq 3J$

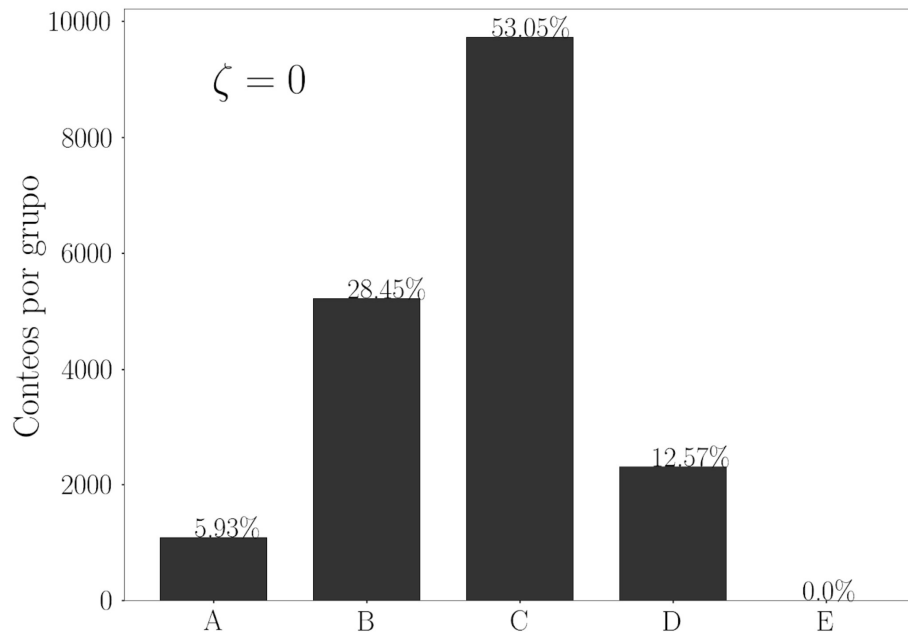
**Figura 23. Dominios de los grupos para valores de  $\Delta_{kj}^{ml}$  (25).**

Donde cada uno se caracteriza por:

- Grupo A: corresponde a un carácter de tipo transición resonante o a una firme transición no resonante; estos valores son los que afectarían de manera considerable la calidad de los resultados de la aplicación de compuertas lógicas o un algoritmo cuántico.
- Grupo B: son aquellos que generarían una fuerte transición no resonante y una notable presencia en la interferencia de estados si se busca aplicar una compuerta.
- Grupo C: estos valores pueden generar transiciones parciales no resonantes; esto significa que la intensidad de la excitación de un estado no deseado no es tan intensa como en las primeras dos categorías.
- Grupo D: corresponde a una posible generación de una transición no resonante inocua o inofensiva; el porcentaje de error que estas transiciones pueden cargar a la hora de aplicar una compuerta es mínimo, pueden ser ignoradas.
- Grupo E: un valor de esta índole implica que no habrá interferencia de otra transición no deseada y su aplicación es segura.

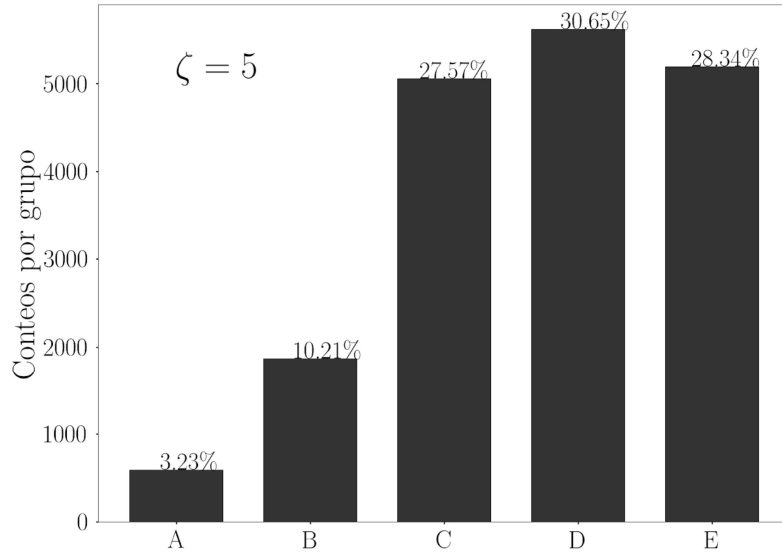
Cabe mencionar que ninguna de las categorías se restringe al caso donde hay dos transiciones a la vez, si no que pueden ser múltiples transiciones interfiriendo sobre una al mismo tiempo; no obstante, esto ya depende completamente de qué estados estén activos en dicho momento<sup>28</sup>. Para mostrar los resultados del código, se utilizará el caso específico para seis qubits.

Los resultados del caso donde  $\zeta = 0$ ,  $\zeta = 5$  y  $\zeta = 50$  se muestran en las **Figura 24**, **25** y **26** respectivamente.

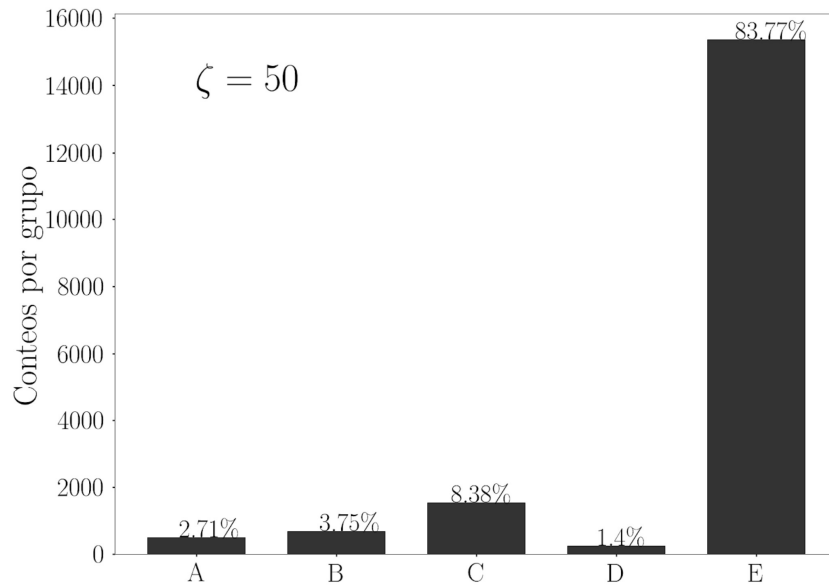


**Figura 24.** Valores de  $\Delta_{kj}^{ml}$  en el caso de  $\zeta = 0$ . Donde  $N = 6$ . Es importante observar que no hay ninguna diferencia de diferencias en el grupo E, por lo que este caso se considera como el peor ya que hay una excesiva sobreposición de las vecindades. Teniendo un número grande de interferencia entre la mayoría de las transiciones, afectando como tal a varios estados.

<sup>28</sup> Un buen ejemplo donde se puede notar fácilmente la interferencia de otros estados ya sea resonante o no resonante es el fenómeno de teleportación cuántica.



**Figura 25. Valores de  $\Delta_{kj}^{ml}$  en el caso de  $\zeta = 5$ . Donde  $N = 6$ . Se puede ver que hay una mayor contribución del grupo E, por lo que se están minorizando los errores. No obstante, todavía existe una considerable afectación de los demás grupos.**



**Figura 26. Valores de  $\Delta_{kj}^{ml}$  en el caso de  $\zeta = 50$ . Donde  $N = 6$ . En esta simulación, los valores entre las diferentes vecindades ya no están afectando a las demás por lo que se puede apreciar que, en porcentaje, los errores disminuyen considerablemente. Estos porcentajes como tal ahora dependen de la proximidad de transiciones dentro de cada categoría. Es el mejor de los casos.**

Los casos mostrados en las **Figuras 24, 25 y 26** evidencian que el peor de los casos se encuentra cuando no hay variación en la frecuencia de Larmor para cada qubit. Mientras que el mejor de los casos se encuentra cuando hay una gran diferencia entre los valores de la frecuencia de Larmor para cada qubit; no obstante, uno podría considerar que una pequeña variación en las frecuencias es suficiente para mejorar considerablemente el desempeño de la computadora cuántica. De igual manera, para complementar el análisis anterior, se hizo una matriz donde se analizan todos los posibles valores de  $\Delta_{kj}^{ml}$ . Esto se hizo a través de una matriz, en la cual cada componente hace referencia a  $\Delta_{kj}^{ml}$  donde se utilizan las diferencias de energías de la ecuación 3.11 agrupadas por su vecindad en el eje de las ordenadas como de las abscisas. Para mantener el ejemplo ilustrativo se mantuvieron los casos donde  $\zeta = 0$ ,  $\zeta = 5$  y  $\zeta = 50$ .

Debido a que cada matriz es simétrica ya que se compara diferencias de energías entre sí, se obtiene la siguiente propiedad

$$\Delta_{kj}^{ml} = \Delta_{ml}^{kj} \quad [3.13]$$

Así mismo, cada valor de la diagonal esta dado por

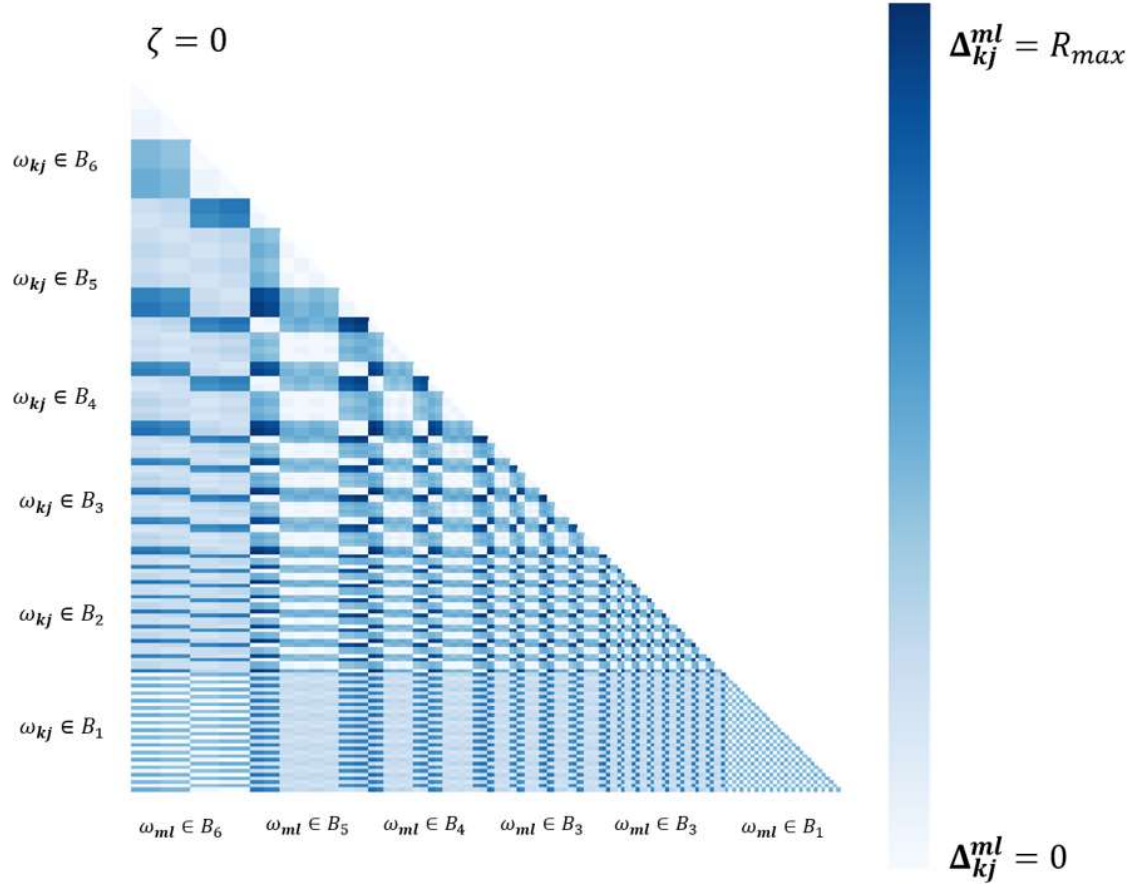
$$\Delta_{kj}^{kj} = 0 \quad [3.14]$$

Por estas razones, para ahorrar poder computacional se decidió simplemente mostrar la parte diagonal inferior de la matriz por debajo de la diagonal ya que todo lo demás sería información repetida.

Los resultados se encuentran en las **Figuras 27, 28 y 29** para  $\zeta = 0$ ,  $\zeta = 5$  y  $\zeta = 50$  respectivamente. Las casillas de color azul marino representan los valores que superan el radio máximo posible determinado en la **Figura 20** para  $N=6$ , perteneciendo al grupo E de la **Figura 23**, dado por la siguiente igualdad.

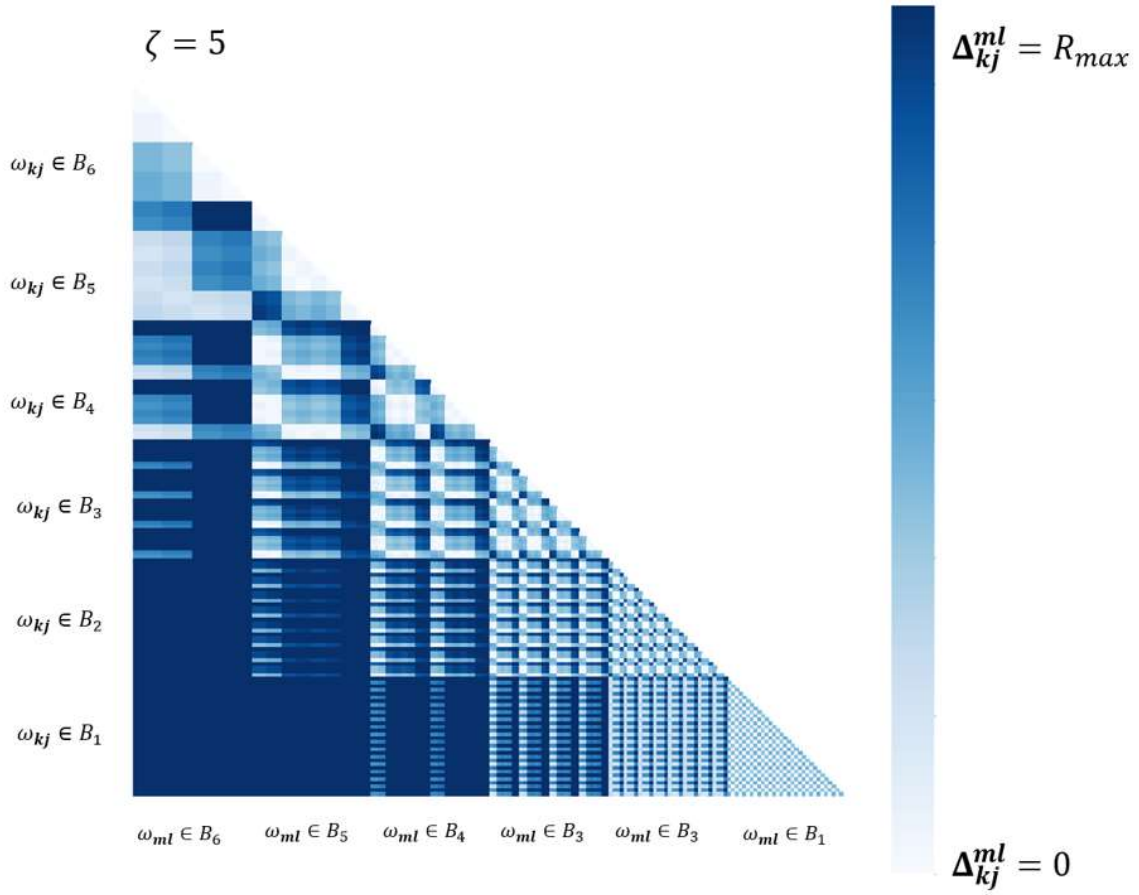
$$R_{max} = J + J' \quad [3.15]$$

Así mismo, entre más tenue sea el color más próximo será su valor a 0 y por ende pertenecerá algún grupo entre A y D.

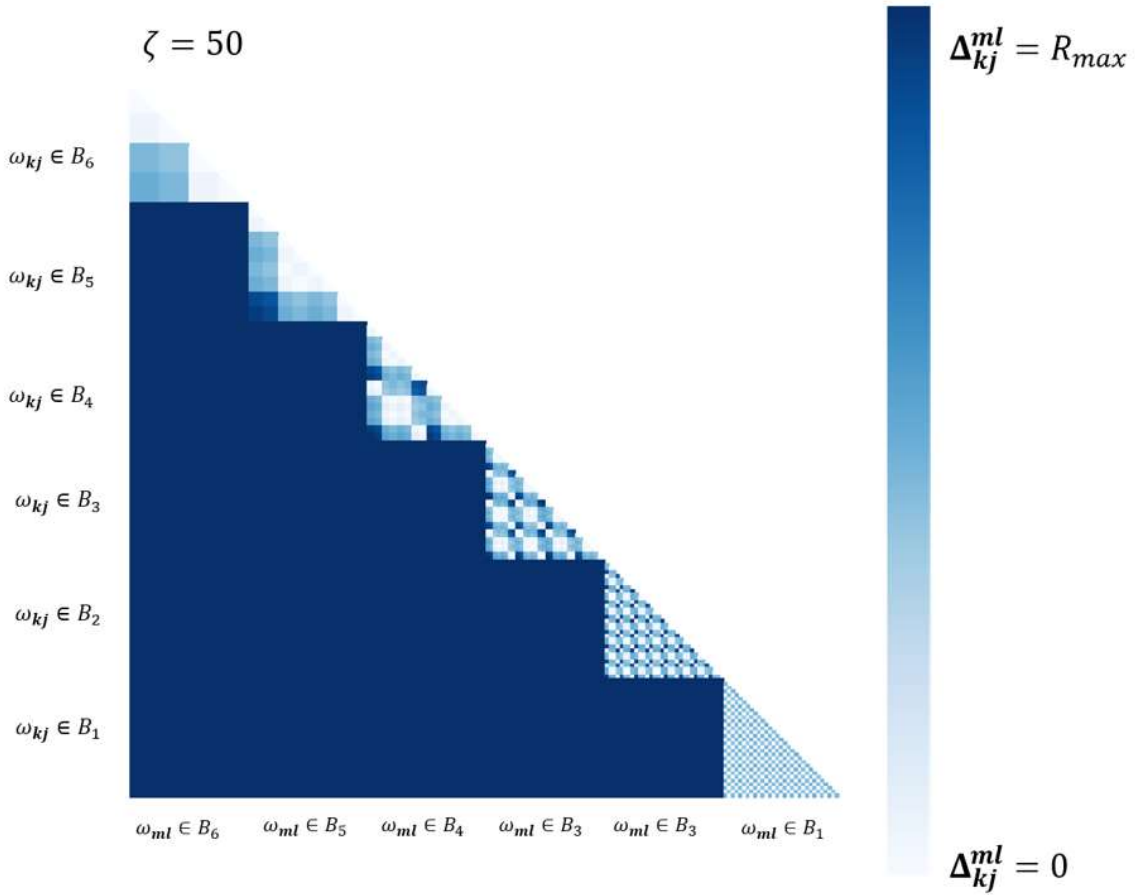


**Figura 27. Matriz de  $\Delta_{kj}^{ml}$  con código de color en el caso de  $\zeta = 0$ . Donde  $N = 6$ . Se tiene una imagen<sup>29</sup> general del comportamiento de las diferencias entre los valores numéricos de las transiciones permitidas del sistema cuántico. Se puede notar que, en proporción, hay muchas secciones muy tenues, haciendo referencia que hay muchos valores cercanos a cero y, por ende, varios problemas. Esto se da debido a que las vecindades se encuentran sobrepuestas entre sí, por lo que los resultados obtenidos en la Figura 24 están en concordancia.**

<sup>29</sup> Debido a que es una imagen general no se pueden rotular los ejes ya que son, para  $N=6$ , existen 196 diferencias de energía, que se tendrían que acomodar en el eje de ordenadas y abscisas.



**Figura 28.** Matriz de  $\Delta_{kj}^{ml}$  con código de color en el caso de  $\zeta = 5$ . Donde  $N = 6$ . Al hacer una comparación respecto a la Figura 26, es posible denotar que existen ahora más regiones oscuras. Esto indica mayor separación entre los valores de  $\Delta_{kj}^{ml}$ . Esto se da debido a que las vecindades opuestas están a una distancia considerable, como la vecindad  $B_1$  con  $B_6$  o  $B_5$  y la vecindad  $B_2$  con  $B_6$ .

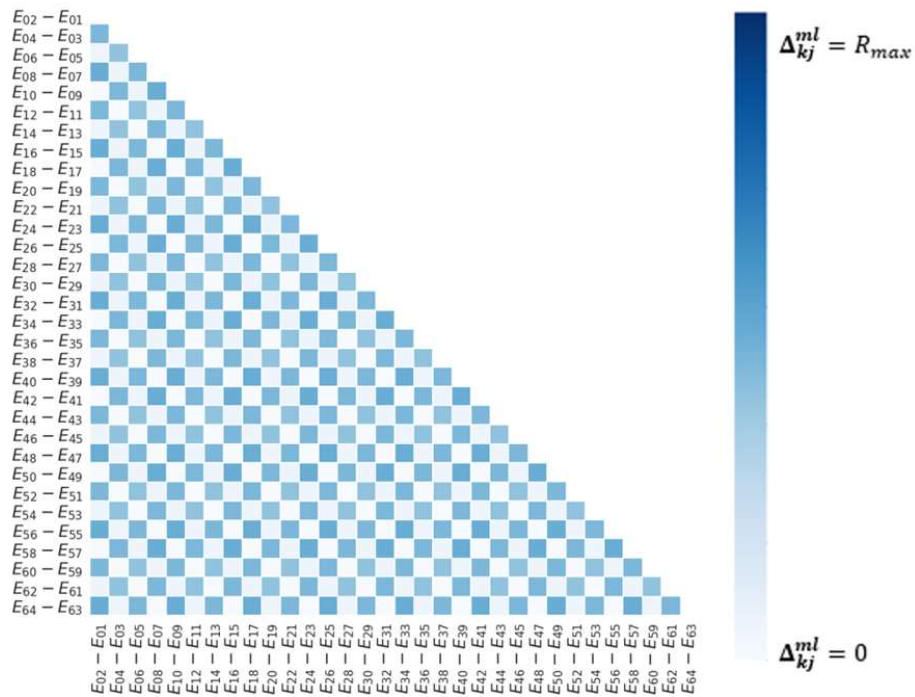


**Figura 29.** Matriz de  $\Delta_{kj}^{ml}$  con código de color en el caso de  $\zeta = 50$ . Donde  $N = 6$ . Se puede apreciar que ahora debido a la gran separación que tienen las vecindades entre sí, no hay una superposición de los valores entre sí, haciendo que las distancias entre ellas sean mayores al radio máximo. Para esta categoría, hay una gran distinción entre las distintas vecindades; no obstante, el número de problemas surge debido a los valores que existen dentro de cada vecindad.

Como se puede observar en las **Figuras 27, 28 y 29**. Cuando se obtienen los valores  $\Delta_{kj}^{ml}$  de la misma vecindad se puede ver que los valores como tal no se ven modificados por el parámetro  $\zeta$ . Esto ocurre debido a que los valores dentro de cada vecindad no dependen de las frecuencias de Larmor, sino solamente de las constantes de acoplamiento, validando los resultados obtenidos en las **Figuras 24, 25 y 26**.



En las **Figura 30-35** se muestra un acercamiento a los valores de  $\Delta_{kj}^{ml}$  de cada vecindad. En esta figura, las etiquetas de cada cuadrícula en los correspondientes ejes se expresan de manera explícita similar a la ecuación 3.11, esto se hizo para poder identificar las transiciones de estados que van a generar problemas. El código para realizar estas imágenes se puede observar en el **Anexo 2**.



**Figura 30. Matriz de  $\Delta_{kj}^{ml}$  para la vecindad  $B_1$ .**

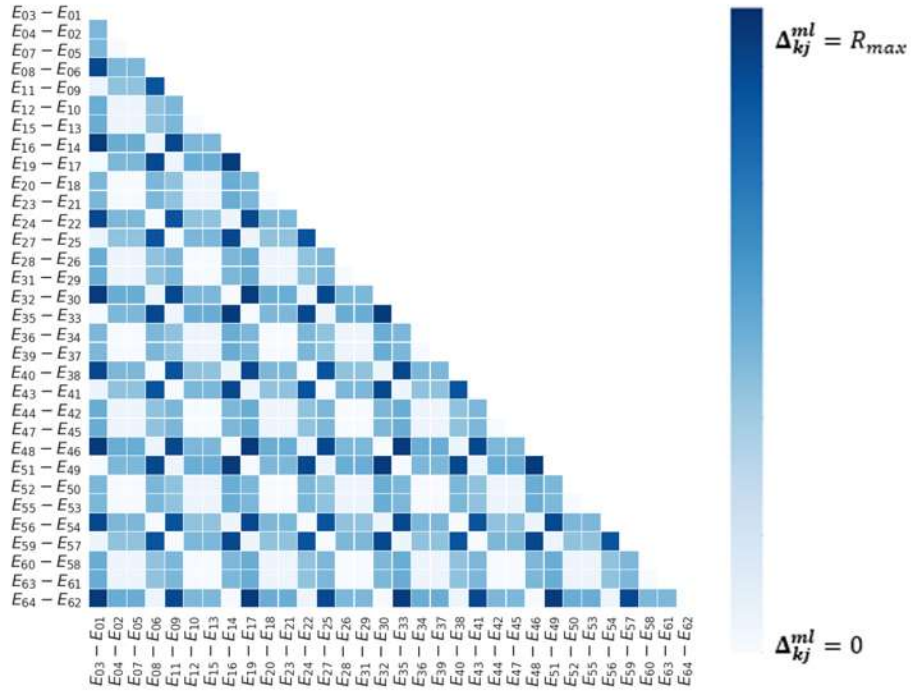


Figura 31. Valores de  $\Delta_{kj}^{ml}$  para la vecindad  $B_2$ .

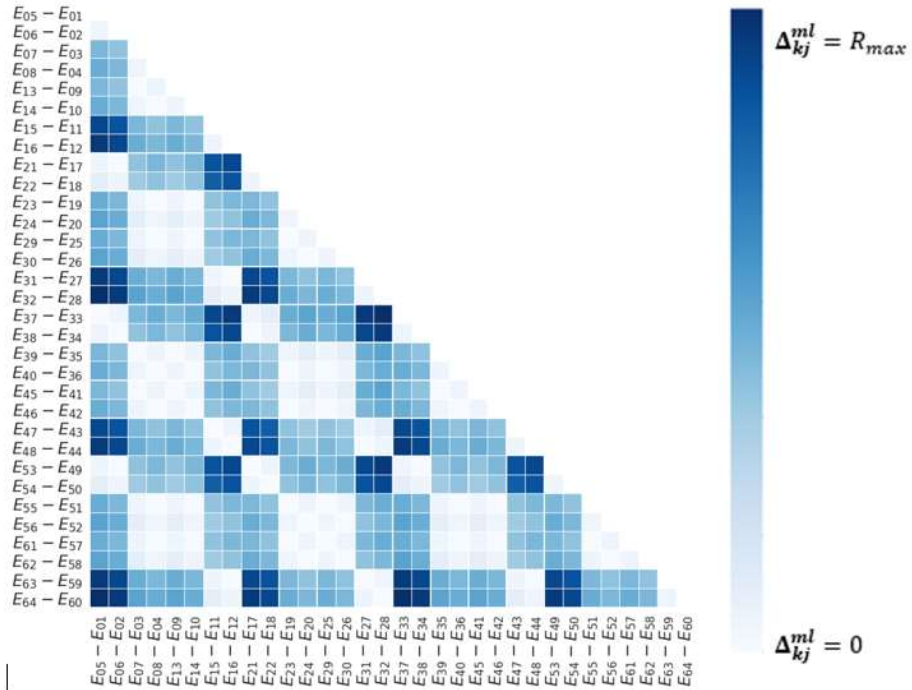


Figura 32. Valores de  $\Delta_{kj}^{ml}$  para la vecindad  $B_3$ .

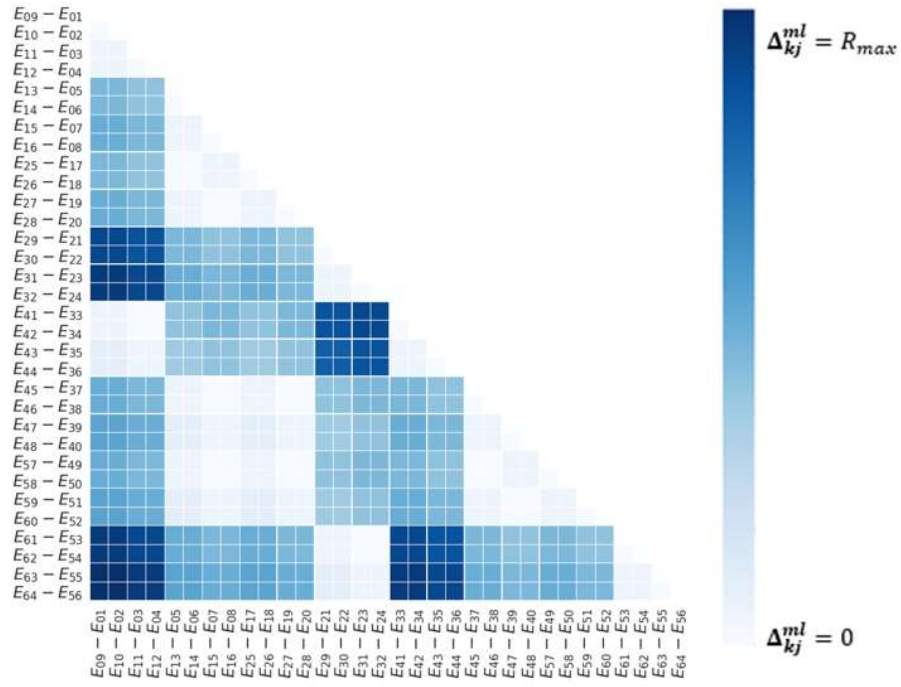


Figura 33. Valores de  $\Delta_{kj}^{ml}$  para la vecindad  $B_4$ .

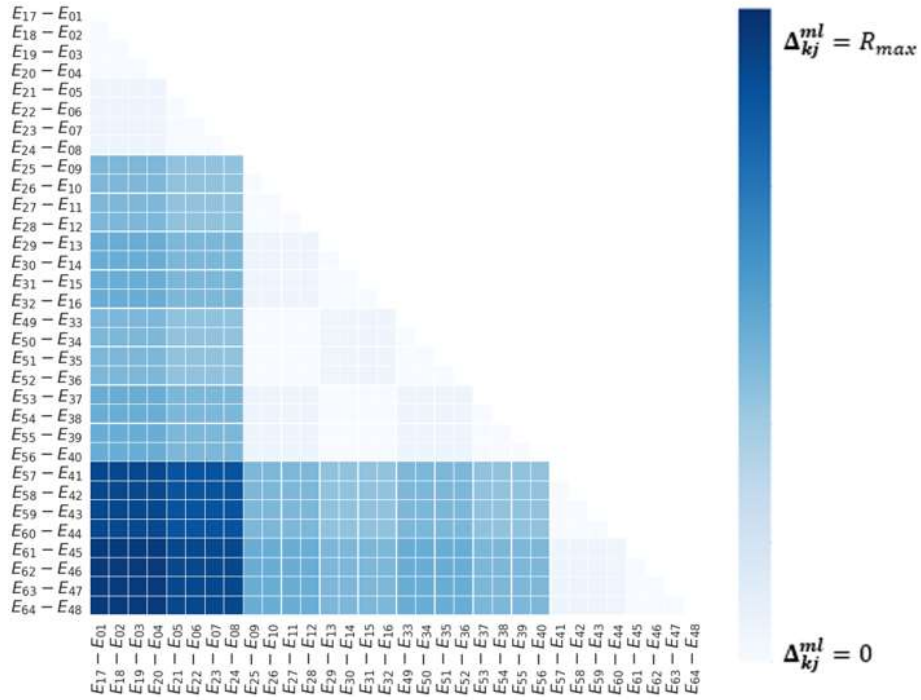
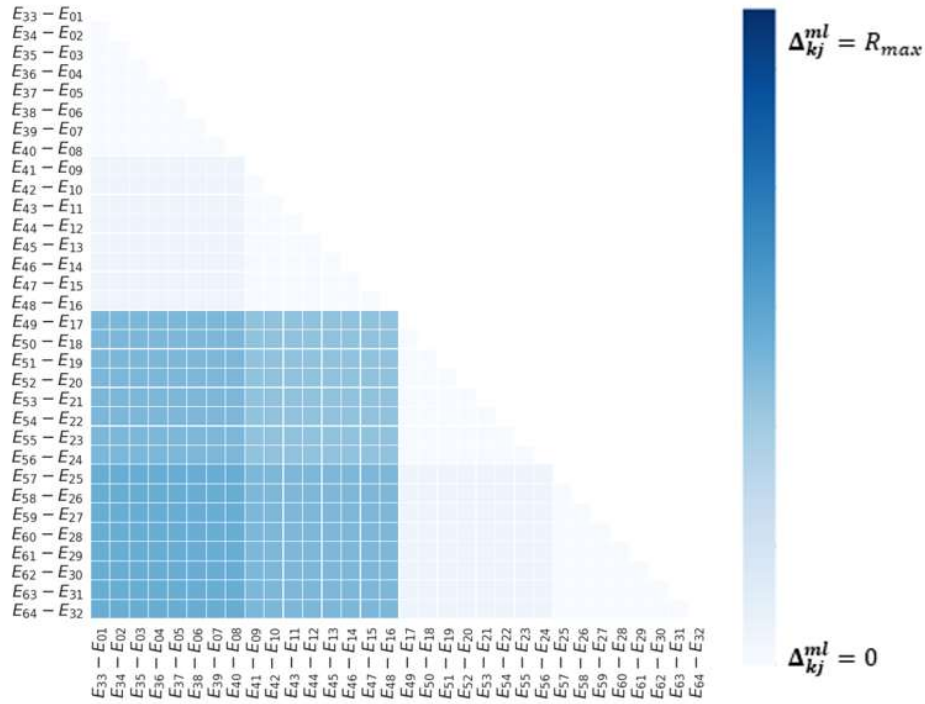


Figura 34. Valores de  $\Delta_{kj}^{ml}$  para la vecindad  $B_5$ .



**Figura 35. Valores de  $\Delta_{kj}^{ml}$  para la vecindad  $B_6$ .**

Existe un patrón interesante para los valores de  $\Delta_{kj}^{ml}$  que pertenecen a las vecindades<sup>30</sup>  $B_2$ ,  $B_3$ ,  $B_4$  y  $B_5$  (**Figuras 34, 33, 32 y 31** respectivamente). Se puede ver que se tiene un comportamiento geométrico general, donde se modifica el tamaño de su patrón conforme las categorías aumentan completando una imagen mayor<sup>31</sup>.

Toda esta información se traduce en que hay una gran importancia de que el campo magnético cumpla con las características ya establecidas; eso es, que su intensidad cambie en el eje  $z$ ; ya que de eso depende directamente cada valor de la frecuencia de Larmor para cada qubit. Si el campo magnético no variara en el eje  $z$ , entonces se tendría el caso de  $\zeta = 0$ , haciendo que el sistema físico, en condiciones ideales, no se pueda comportar como computadora cuántica. Es por esto que es necesario

<sup>30</sup> Estas vecindades no pertenecen a los extremos 1 y N.

<sup>31</sup> Se especula que esto se puede escribir de una manera matemática debido a que se puede generalizar una expresión por si se tienen N qubits y por ende generar la matriz correspondiente; sin embargo, esto se propone como trabajo futuro.

encontrar un valor de umbral para  $\zeta$  para asegurar que exista una buena separación entre las vecindades, sin embargo, dentro de cada vecindad, el parámetro  $\zeta$  no es de importancia.

Como es de esperarse, el número de errores entre las mismas compuertas incrementaría conforme se aumenta el número de qubits debido a que numéricamente se pudo observar que los radios de cada categoría no varían, indicando que un nuevo conjunto de transiciones tiene que estar dentro de cada categoría, haciendo muchas de ellas virtualmente indistinguibles, y por ende generando transiciones no resonantes y no deseadas.

Por otro lado, otra actividad que consumió mucho tiempo de las horas PAP fue la redacción de un texto que contuviera la explicación ya redactada para su publicación como artículo. Además de dicho texto, también se le dio prioridad al texto que trata una breve introducción a la computación cuántica, acompañado de una descripción del sistema que se trató para el PAP I y PAP II. Cabe mencionar que ambos textos fueron redactados en inglés.

El texto que se piensa publicar como artículo lleva el nombre de: *RESONANT AND NON-RESONANT TRANSITIONS ON A LINEAR CHAIN OF C13 CARBON ATOMS IN A DIAMOND STRUCTURE*. Mientras que el texto que se piensa publicar como libro, por ahora<sup>32</sup>, lleva el nombre de: *BRIEF LECTURES ON QUANTUM MECHANICS*.

Concretamente, el libro está compuesto de diez capítulos y tres apéndices. El primer capítulo aborda el tema la computación clásica y de compuertas lógicas que pueden ser reproducidas a través de componentes electrónicos como los transistores semiconductores. Los siguientes dos tratan la teoría de la mecánica cuántica y qué es la computación cuántica, respectivamente; estos dos capítulos se encargan de

---

<sup>32</sup> Esto es porque seguimos trabajando en él y puede que el título cambie.  
FO-DGA-CPAP-0017

dar las bases mínimas necesarias para entender lo que se trabajó en el PAP I y en el PAP II. El cuarto capítulo habla sobre la descripción del sistema físico, donde se muestran las imágenes de la estructura cristalina del diamante y la forma del campo magnético al que este va a ser sometido. En el capítulo quinto, sexto y séptimo se redacta cómo resolver un sistema físico compuesto por 1, 2 y 3 qubits, respectivamente. El octavo capítulo aborda un análisis para  $N$  qubits (a pesar de que en el PAP II todavía se trabajó la teoría de 4 qubits, se decidió no redactar sobre ella porque con los primeros 3 sistemas vimos que fue suficiente para la generalización). El capítulo nueve habla sobre las transiciones de estados del sistema físico y cómo es que puede haber presencia de transiciones resonantes o no resonantes no deseadas, dependiendo del valor de la frecuencia del Larmor. Por último, el décimo capítulo habla sobre la teleportación cuántica; se presenta el protocolo y la explicación paso a paso de un código en PYTHON para su simulación; esto con el objetivo para dejar más claro al lector de por qué el sistema físico puede ser considerado como un modelo para ser presentado como computadora cuántica.

En cuanto a los apéndices del texto: el apéndice A habla sobre la matemática de la mecánica cuántica en notación de Dirac, el apéndice B es una descripción del método de Runge-Kutta de cuarto orden adaptado al sistema de ecuaciones que se han tratado desde el PAP I y, por último, el apéndice C muestra un código en PYTHON sobre cómo generar las reglas de selección para un sistema de  $N$  qubits; ya que este es el corazón del código que simula un sistema de  $N$  qubits.

Debido a que todavía seguimos trabajando en detalles y mejoras del escrito, puede que este cambie en cuanto a número de capítulos, apéndices o número de páginas. Por ahora, el escrito está compuesto de más de 80 páginas; sin contar las referencias.

#### 4. Reflexiones del alumno o alumnos sobre sus aprendizajes, las implicaciones éticas y los aportes sociales del proyecto

- Aprendizajes profesionales

##### *Karina Chiñas Fuentes*

Durante este segundo periodo de PAP II, considero que la principal fortaleza que llevo es la redacción de documentos de alta calidad en inglés; ya que para ello tuve que consultar diversas fuentes que me guiaran sobre cómo redactar de tal forma que diera un impacto deseado sobre el lector. Además, consulté diversas fuentes para sustentar o guiar cada idea presentada en los textos. Por otro lado, la redacción de temas sobre computación cuántica y mecánica cuántica me ayudaron a visualizar las debilidades que tenía sobre ellas y reforzarlas con artículos o libros calidad. Asimismo, mejoré mis habilidades y conocimiento en los sistemas operativos que se utilizaron para desarrollar y probar cada código; especialmente Ubuntu y Jupyter.

De este proyecto aprendí que, a pesar de que el sistema físico en cuestión sea muy difícil de traerlo a la realidad, es posible conocer muchas propiedades del mismo que pueden servir como cimiento para un modelo más complejo y real. A pesar de que el área de ciencia y tecnología no se posicionan como tema de interés para el país, considero que trabajar sobre temas como este permite despertar la curiosidad abrir las puertas de oportunidades a quienes tienen gran capacidad de desarrollar soluciones a los problemas que la ciencia hoy en día presentan; pienso que esto importante ya que se podrían llegar o abordar soluciones viables que traten temas sociales de forma directa, tal como enseñar sobre diversos temas a comunidades de bajos recursos.

Cabe mencionar que en cuanto me gradúe de la universidad, voy a buscar entrar a un posgrado de física teórica (o área afín), por lo que, el haber tenido la experiencia de dos semestres en el área de investigación de física teórica me aporta confianza, de que puedo con tal reto, y emoción de hacerlo.

*Daniel Hernández Mota*

Una de las mayores competencias que me ayudó a desarrollar este proyecto de aplicación profesional fue la identificación de patrones para generar expresiones matemáticas o código aplicable. Por esto mismo considero que hubo un incremento en mis habilidades lógico-matemáticas, así como algorítmicas debido a que después de generalizar varias veces, me fue más sencillo generar los programas que quería y por ende poder comprobar si en realidad se mostraban estos patrones. Así mismo, me impulsó a mejorar el aprendizaje autónomo y el trabajo en equipo paralelizando las actividades del semestre. Por último, la habilidad que también me ayudó fue la colaboración debido a que me comuniqué con varias personas para obtener ayuda de distintos profesores e ingenieros que poco a poco fueron aportando ideas que servían en general para el proyecto.

Logré visualizar que una herramienta muy poderosa es la programación ya que define de manera numérica las abstracciones matemáticas que se pueden tener en la mente plasmándolas mediante gráficos y simulaciones que también ayudan a identificar patrones.

Me di cuenta que en efecto proponer un sistema físico viable para hacer computación cuántica solamente es viable para un pequeño número de partículas pero conforme se va aumentando, comienza a haber diversos problemas intrínsecos y una vez que se solucionen se tienen que poner a prueba otro tipo de problemas físicos, es por esto que la investigación teórica es importante, ya que no se gastan recursos para poder determinar la función y el comportamiento de lo que se investiga y al final se puede obtener la viabilidad con los parámetros que se calcularon.

Mucha información se puede obtener de una proposición dada, por lo que es importante intentar desarrollar algo que aún no se ha implementado para contribuir de manera significativa al campo de investigación. Es por esto que es necesario



tener conocimiento de diversos campos como métodos numéricos, teoría de grupos, física cuántica, algoritmos y programación; es decir toda una gama de herramientas que puedan servir para mejorar los resultados.

- Aprendizajes sociales

### *Karina Chiñas Fuentes*

Este proyecto, junto con otra clase del ITESO, me ha dado a pensar en que tengo la capacidad de desarrollar un proyecto que trate la problemática de la educación en México, especialmente a aquellas comunidades de bajos recursos. En lo personal, me gustaría desarrollar o trabajar en un grupo que enseñe las matemáticas y ciencias exactas básicas de manera gratuita a diversas regiones que se encuentran en pobreza; claro que, esto con la ayuda de otras personas que dominen otras áreas del conocimiento, especialmente socioeconómicas y psicopedagógicas. Me gustaría mencionar que este *sueño* se fundamenta en el caso de la indígena mixe, Tania Eulalia Martínez Cruz, quien logró hacer un doctorado en agronomía en Holanda (29) y en el indígena zapoteco, Ricardo Pablo Pedro, quien llegó a obtener una beca para estudiar un doctorado en la prestigiosa Universidad de Massachussets (30).

A pesar de que este proyecto, como tal, no fue fundamentado para un impacto social directo y a grande escala, tiene la capacidad de tener un impacto sobre las personas que tienen un nivel de matemáticas y física avanzadas; para que a partir de ellas puedan desarrollar ideas diferentes y así poder proponer soluciones a otro tipo de problemas. Además, cabe mencionar que, por la naturaleza del tipo de investigación y cómo esta se clasifica en la que se encuentra en el país, no se pudo tener dar un aporte económico al mismo; no obstante, considero que no se limita a lograr un impacto de este índole en el futuro, ya sea de manera directa (que se desarrolle desde el país) o indirecta (que se desarrolle en otro país pero México obtenga considerables ganancias sobre ello).

*Daniel Hernández Mota*

Como tal, no existe un impacto social inmediato al estar trabajando con investigación teórica en física cuántica, sin embargo, el potencial que podría tener para poder solventar problemas futuros es muy grande, y por esto mismo vale la pena seguir intentando. Se tienen ya conceptualizados varios algoritmos cuánticos para hacer funcionar un código, no obstante, es propenso buscar una arquitectura definida para poder enfrentar los posibles problemas que podrían tener. Esto se logra al meterse de lleno, caracterizar las arquitecturas propuestas e intentar evadir o solucionar los problemas que tengan. No obstante, esto puede ir más allá de solamente intentar generar un cambio social, sino que también al proporcionar información, es posible que se pueda orientar al ámbito educativo, brindando información de calidad a aquellas personas que busquen alguna introducción al tema, o brindándole las referencias y matemáticas necesarias para mejorar los distintos procesos de aprendizaje.

El proyecto puede tomar varias vertientes y podría modificarse de alguna manera para abarcar aspectos desde un punto de vista más social al brindar apoyo en matemáticas o inclusive como tal en educación. La información siempre va a ayudar a generar un cambio o se puede encontrar alguna aplicación en algún otro campo, por esto mismo es imperativo continuar desarrollando conocimiento sobre estos temas especializados e intentar traducirlos a algo más cotidiano.

- Aprendizajes éticos

*Karina Chiñas Fuentes*

El proyecto me ha ayudado a no sólo mejorar mis habilidades de trabajo en equipo, sino que también ha mejorado mi habilidad como líder y persistencia, ya que en varias ocasiones yo le di forma y dirección a ambos textos importantes que se trabajaron durante el semestre. Por otra parte, el hecho de que este proyecto no haga necesaria nuestra presencia en el centro de investigación me hizo ejercer mi valor de responsabilidad, ya que hubo ocasiones en las que no podía atender el

PAP como se tenía ya marcado para la semana; sin embargo, en toda ocasión terminaba mi trabajo o trabajaba de más. Esta experiencia, sin duda, ha reforzado el que quiera dedicar mi vida, principalmente, en la investigación en física teórica; además, me ha dado una visión de dónde y cómo podría hacerlo.

#### *Daniel Hernández Mota*

Para llevar a cabo la realización del proyecto fue necesario tomar una serie de decisiones críticas dándole así una forma concisa. Primeramente, una decisión importante que se tomó fue dejar afuera ciertos parámetros para enfocar los esfuerzos en las características del sistema. Fue un punto interesante determinar generalizaciones de todos los aspectos del sistema, esto comenzó a direccionar el camino de la investigación orientando a determinar los problemas intrínsecos que existían por el sistema que se había propuesto. Mejorando y ayudando a enfocar los puntos de vista en algo más central. Posteriormente, se realizó un análisis cada vez más específico, puntos que le ayudaron a mi compañera para realizar textos de calidad.

Como tal, el peso de tomar una mala decisión recae en el tiempo que se utiliza para desarrollar la idea. Esto ocurrió al intentar solucionar ciertos aspectos con métodos numéricos en lugar de hacerlo analíticamente. Aunado a esto, se otorgó una gran libertad al manejo del tiempo y el espacio que le dedicaríamos al proyecto de aplicación profesional, por lo que se forjó la responsabilidad de cumplir con determinadas condiciones, así como un sentido de compromiso a terminar y expresar de manera concisa los resultados.

Después de la experiencia del PAP, me es posible decir que puedo adaptarme a las condiciones que yo estaré sujeto tomando en cuenta el progreso y productividad, por lo que al ejercer mi profesión ya sabré como distribuir de una mejor manera mis tiempos.

- Aprendizajes en lo personal

*Karina Chiñas Fuentes*

Una de las principales cosas que me dejó ver el PAP es que, con un poco de imaginación y matemáticas básicas, se puede llegar a determinar características muy importantes del sistema. Esto lo menciono porque el Dr. Gustavo siempre nos dio la libertad de qué dirección darle a la investigación; claro, mientras nos asesoraba con ideas matemáticas o resultados de diversos artículos de investigación. Es por ello que salió el código de diferencias de diferencias de energías (que no requiere de matemáticas avanzadas), un tema que no se había abordado antes para dicho sistema en otros centros de investigación. Todo en conjunto, me ha hecho reflexionar sobre mis capacidades de aportar y proponer soluciones para problemas en específicos y comunicar lo que se hace de forma clara y concisa. Asimismo, me ha hecho valorar el hecho de que haya tenido la oportunidad de compartir esta experiencia con alguien más, porque sé que, en definitiva, los resultados de los avances tan importantes no hubieran sido los mismos sin mi compañero; en esta experiencia confirmo el pensamiento de que tratar y discutir ideas con otra persona abre las puertas a una investigación de mayor calidad. Por último, esta investigación me dejó ver cómo es la dinámica de posgrados en la Universidad de Guadalajara en mis áreas de interés, haciendo que influya en mi consideración como opción de universidad para mis posgrados.

*Daniel Hernández Mota*

La investigación en física cuántica es algo que me apasiona y el proyecto de aplicación profesional me dejó ver eso. Pude dictaminar que proponer un sistema físico para que cumpla con los requisitos necesarios puede desarrollarse de manera exponencial y se puede obtener distinta información valiosa a través de una simple idea. Aunque existan procesos matemáticos difíciles, se puede lograr obtener información relativamente confiable.

Es necesario tener un trabajo dónde se desarrolle el equipo ya que esto ayuda a rectificar las ideas, mejora el proceso de una manera lineal ya que se paralelizan los resultados y se complementan las ideas. Esto contribuye a un mejoramiento del proyecto y genera distintos puntos de vista que no se han considerado aumentando la calidad de los resultados.

Para mi proyecto de vida, me gustaría especializarme en temas similares ya que son un punto muy importante de mi vida, y esto apenas es el comienzo de lo que podría llegar a desarrollarse. Así mismo, puedo ver la importancia de otros conocimientos que, uno al principio creería que están separados, pero al final de cuentas, aportan algo que podría servir. Es por esto que la información es necesaria por lo que los cursos son muy importantes, tener ideas generales de temas ayuda a entender esto de manera más práctica.

## 5. Conclusiones

Gracias a lo que se trabajó en PAP I, se pudo desarrollar las destrezas pertinentes en la elaboración de un programa en PYTHON, y otro en FORTRAN, para la simulación con consideraciones ideales de una computadora cuántica con 4 qubits. También se pudo desarrollar una generalización del programa para tener un código en PYTHON que resuelve el sistema de ecuaciones diferenciales para N qubits; estos códigos son capaces de representar la aplicación de una compuerta lógica cuántica o un algoritmo importante de la computación cuántica, tal como la Teleportación cuántica, estados de Bell o el estado de Greenberger-Horne-Zeilinger.

Así mismo, al obtener generalizaciones se pudieron desarrollar más algoritmos en PYTHON donde se analizaban varios factores intrínsecos de la computadora cuántica, que evidenciaban el desempeño de la misma. El proceso se llevó a cabo determinando las energías y las reglas de selección para poder representar todas las transiciones posibles y posteriormente comparar estas mismas para identificar los problemas que se generan como transiciones no resonantes o no deseadas. El

uso de herramientas tecnológicas como UBUNTU, OVERLEAF y JUPYTER se utilizaron para llevar a cabo la investigación de manera efectiva y eficaz.

También se realizaron considerables avances a las notas de computación cuántica en LATEX, las cuales tienen como objetivo mantener la información trabajada en un registro de fácil consulta para quien quisiera adentrarse al tema o tener una idea de cómo implementar métodos numéricos para la resolución de un sistema cuántico. Consideramos que las notas en LATEX son de alta calidad y tienen todo el potencial para ser publicadas como un libro.

Como trabajo a futuro, para quien desee seguir desarrollando información sobre este proyecto de aplicación profesional, podría considerar una investigación en torno a encontrar una expresión general de las diferencias de transiciones para poder simular de manera práctica cualquier caso de  $N$  qubits. Así mismo, debido a que la mayoría de los problemas son ocasionados por el factor de la constante de acoplamiento, algún material donde este valor sea lo suficientemente grande podría solventar ciertos impedimentos que se tienen con la arquitectura actual. Por último, investigar el comportamiento del sistema cuando éste no se encuentra aislado; eso es, agregar ruido y estudiar su decoherencia.

## 6. Bibliografía

1. **Paredes López, Mireya.** CINVESTAV. *Simulación de Cómputo Cuántico*. [En línea] Departamento de Computación, 10 de Enero de 2007. [Citado el: 06 de Septiembre de 2018.]  
<http://www.cs.cinvestav.mx/TesisGraduados/2007/tesisMireyaParedes.pdf>.
2. **Miranda, Nasser Darwish.** nasserdaewish.eu. *Computación Cuántica*. [En línea] Universidad de La Laguna, 2005. [Citado el: 06 de Septiembre de 2018.]  
[http://nasserdarwish.eu/FILES/Computacion\\_Cuantica.pdf](http://nasserdarwish.eu/FILES/Computacion_Cuantica.pdf).
3. **Collazo Rodríguez, Wendolin.** Avance y Perspectiva CINVESTAV. *Resolver problemas de impacto social*. [En línea] 1 de Diciembre de 2017. [Citado el: 06 de Septiembre de 2018.]  
<http://ayp.cinvestav.mx/Publicaciones/ArtMID/4126/ArticleID/1493/%E2%80%9CR esolver-problemas-de-impacto-social%E2%80%9D>.
4. **Inc., D-Wave Systems.** DWAVE. *The D-Wave 2000Q™ System*. [En línea] D-Wave Systems Inc. The Quantum Computer Company, 2018. [Citado el: 18 de 10 de 2018.] <https://www.dwavesys.com/d-wave-two-system>.
5. **Tarifa, Enrique Eduardo.** Econ.Unicen. *Teoría de Modelos y Simulación*. [En línea] Universidad Nacional de Jujuy. [Citado el: 06 de Septiembre de 2018.]  
[https://www.econ.unicen.edu.ar/attachments/1051\\_TecnicasIISimulacion.pdf](https://www.econ.unicen.edu.ar/attachments/1051_TecnicasIISimulacion.pdf).
6. **Gutiérrez Rojas, Ivan R., Peralta Benítez, Hipólito y Fuentes González, Homero C.** Scielo. *Cultura científica y cultura científico investigativa*. [En línea] 2018. [Citado el: 06 de Septiembre de 2018.]  
<http://scielo.sld.cu/pdf/hmc/v18n1/hmc03118.pdf>.

7. *Numerical Simulation of a quantum controlled-not gate implemented on four spin molecules at room temperature.* . **López, G., Quezada, J., Berman, G., Doolen, G., y Tsifrinovich, V.** Opt. 5, México; USA. : IOP Science, 2003. PII: S1464-4266(03)53976-3 .
8. **López, G., Chiñas, K., y Hernández, D.** Algoritmos cuánticos implementados en una computadora de diamante C12-C13. “*Algoritmos cuánticos implementados en una computadora de diamante C12-C13*”, Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías de la Universidad de Guadalajara, Guadalajara, Jalisco. Guadalajara, Jalisco, México : ITESO, Diciembre de 2018.
9. **Peña, Antonio.** Redalyc. *La investigación científica en México. Estado actual, algunos problemas y perspectivas.* [En línea] enero de 1995. [Citado el: 06 de Septiembre de 2018.] <http://www.redalyc.org/pdf/132/13206702.pdf>. ISSN: 0185-2698.
10. **Scherer, Leopoldo García-Colín.** UNAM. *La ciencia y el Estado.* [En línea] Instituto de Investigaciones Jurídicas de la UNAM. [Citado el: 07 de Septiembre de 2018.] <https://archivos.juridicas.unam.mx/www/bjv/libros/6/2873/11.pdf> .
11. **UNESCO.** Banco Mundial. *Gasto en investigación y desarrollo (% del PIB).* [En línea] Instituto de Estadística de la Organización de las Naciones Unidas para la Educación, la Ciencia y la Cultura, 2018. [Citado el: 06 de Septiembre de 2018.] [https://datos.bancomundial.org/indicador/GB.XPD.RSDV.GD.ZS?locations=MX-ZJ&year\\_high\\_desc=false](https://datos.bancomundial.org/indicador/GB.XPD.RSDV.GD.ZS?locations=MX-ZJ&year_high_desc=false).
12. **Olivares Alonso, Emir.** La Jornada. *Recorte presupuestal al Conacyt impactará las becas de posgrado.* [En línea] 22 de Marzo de 2017. [Citado el: 06 de Septiembre de 2018.] <https://www.jornada.com.mx/2017/03/22/sociedad/035n1soc>.



13. **Cassani, Emiliano.** Ciencia UNAM. *Complicado panorama presupuestal para la ciencia en México*. [En línea] Universidad Nacional Autónoma de México, 04 de Febrero de 2018. [Citado el: 06 de Septiembre de 2018.]  
<http://ciencia.unam.mx/leer/705/complicado-panorama-presupuestal-para-la-ciencia-en-mexico>.
14. **Toche, Nelly.** El Economista. *Recortan 13.6% presupuesto para ciencia y tecnología*. [En línea] 16 de 12 de 2018. [Citado el: 11 de 02 de 2019.]  
<https://www.eleconomista.com.mx/arteseideas/Recortan-13.6-presupuesto-para-ciencia-y-tecnologia-20181216-0037.html> .
15. **Borbolla, Kathia.** Debate. *Suspenden programas de ciencias por falta de recursos del Conacyt*. [En línea] 29 de 01 de 2019. [Citado el: 11 de 02 de 2019.]  
<https://www.debate.com.mx/mexico/Suspenden-programas-de-ciencias-por-falta-de-recursos-del-Conacyt-20190129-0155.html>.
16. **Maya Higuera, Victor.** Sociedad Mexicana de Física. *Convocatoria Veranos Científicos en Óptica Cúantica, Materia Fría e Información Cuántica 2018*. [En línea] Sociedad Mexicana de Física, 21 de Mayo de 2018. [Citado el: 06 de Septiembre de 2018.] <https://www.smf.mx/convocatoria-veranos-cientificos-en-optica-cuantica-materia-fria-e-informacion-cuantica-2018/>.
17. **Commission, United States Securities and Exchange.** FORM D. *Notice of Exempt Offering of Securities*. Washington D.C. : s.n., 2018. OMB APPROVAL: 3235-0076.
18. **Venegas Andraca, Salvador E.** *Workshop on Quantum Computation using IBM Q*. Ciudad de México : Tecnológico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, 2018. 1.

19. **Zwiebach, Barton.** EDX. *Overview of Quantum Mechanics: Necessity of Complex Numbers*. [En línea] Massachusetts Institute of Technology, 2017. [Citado el: 6 de Octubre de 2018.] [https://courses.edx.org/courses/course-v1:MITx+8.04.1x+3T2017/courseware/week1/lecture1/6?activate\\_block\\_id=block-v1%3AMITx%2B8.04.1x%2B3T2017%2Btype%40vertical%2Bblock%40v-vid1-3](https://courses.edx.org/courses/course-v1:MITx+8.04.1x+3T2017/courseware/week1/lecture1/6?activate_block_id=block-v1%3AMITx%2B8.04.1x%2B3T2017%2Btype%40vertical%2Bblock%40v-vid1-3).
20. **Gasiorowicz, Stephen.** Quantum Mechanics. *Quantum Mechanics*. United States of America : Wiley, 2003.
21. **López, Gustavo.** Notas de Computación Cuántica. Guadalajara, Jalisco : s.n., 2018. Curso 3.
22. **Griffiths, David J.** Quantum Mechanics. *Quantum Mechanics*. United Kingdom : Cambridge University Press, 2017.
23. **Vazirani, Umesh.** Qubits, Quantum Mechanics, and Computers. California : University of California, Berkeley, 2012.
24. **Michael A. Nielsen, Isaac I. Chuang.** *Quantum Computation and Quantum Information*. United Kingdom : Cambridge University Press, 2010. 978-1-197-00217-3.
25. **Chiñas, K. Hernández, D.** Autoridad Propia. Guadalajara : s.n., 2018.
26. **López, G., Gorin, T. y Lara, L.** Simulation of Grover's quantum search algorithm in an Ising-nuclear-spin-chain quantum computer with first and second-nearest-neighbour couplings. Guadalajara, Jalisco, México : IOP Publishing, 2008. 41. doi:10.1088/0953-4075/41/4/055504.
27. **García, Angel Franco.** Sistema de Ecuaciones Diferenciales de Primer Orden. *Procedimientos Numéricos en Lenguaje Java*. [En línea] Universidad del País Vasco, 2000. [Citado el: 18 de Octubre de 2018.]

<http://www.sc.ehu.es/sbweb/fisica/cursoJava/numerico/eDiferenciales/rungeKutta/rungeKutta1.htm>.

28. *Decoherence: Concepts and Examples*. **Kiefer, C. y Joos, E.** Berlin : Springer, 1998.

29. **Reséndiz, Francisco**. El Universal. *Últimos pesos de indígena mixe la llevaron a Holanda*. [En línea] 13 de 08 de 2016. [Citado el: 11 de 05 de 2019.]

<http://www.eluniversal.com.mx/articulo/nacion/sociedad/2016/08/13/ultimos-pesos-de-indigena-mixe-la-llevaron-holanda>.

30. **López, Patricia**. UNAM. *ORIGINARIO DE OAXACA CURSA DOCTORADO EN MASSACHUSETTS*. [En línea] Digital UNAM, 16 de 11 de 2017. [Citado el: 11 de 05 de 2019.] <http://www.gaceta.unam.mx/20171116/originario-de-oaxaca-cursa-doctorado-en-massachusetts/>.

## Anexos

### Anexo 1. Código en PYTHON para N qubits: estado GHZ.

```
import numpy as np
from numpy import sin, cos, sqrt, pi
import matplotlib.pyplot as plt
from matplotlib.pyplot import savefig
import matplotlib.path_effects as path_effects

sstyle = "seaborn-poster"
plt.style.use(sstyle)
plt.rc('text', usetex = True)
plt.rc('font', family = 'serif')
plt.rc('xtick', labelsizes=35)
plt.rc('ytick', labelsizes=35)

#TODO LOS ESTADOS POSIBLES
def allstates(N):
    k = [ x for x in range(2**N) ]
    k[0] = np.arange(1)
    k[1] = np.arange(1,2)
    m = 1
    while m < N:
        for l in range(2**m):
            k[2**m + l] = np.concatenate(( np.arange(1), k[l] ))
            k[2**m + l][0] = 1
            k[l] = np.concatenate(( np.arange(1), k[l] ))
        m += 1
    return [ list(x) for x in k ]

#ENERGIAS DEL SISTEMA POR UNIDAD DE h-barra
def Energy(estado, larmor, ising):
    global Num
    estado = np.array(estado)
    larmor = np.array(larmor)
    one = (-np.ones(Num))*estado
    energy_NI = np.dot(one,larmor)
    estado = list(estado)
    energy_I = 0
    for j in range(Num-1):
        for i in range(Num-(j+1)):
            energy_I = energy_I + (ising[j]*(-
1)**(estado[i]+estado[i+(j+1)]))
    Energy_States = -0.5*( energy_NI + 0.5*energy_I )
    return Energy_States

#REGLAS DE SELECCIÓN
def rules(numqubits):
    reglas = [ [] for i in range(2**numqubits) ]
```

FO-DGA-CPAP-0017

```

for b in range(numqubits):
    c = b + 1
    for a in range(2**(c)):
        if a < 2**c/2:
            reglas[a].append(int( (a + 1 + 2**(c-1) )%(2**c)
))
            if reglas[a][b] == 0:
                reglas[a][b] = 2**c
        elif a >= 2**(c-1):
            for i in range(len(reglas[ int( a-2**(c-1) ) ])):
                reglas[a].append( int( ( reglas[int( a-2**(c-1)
)] [i] + 2**(c-1))%(2**c) ) )
                if reglas[a][i] == 0:
                    reglas[a][i] = 2**c
    reglas = [sorted(x) for x in reglas] #sorted: acomoda de
menor a mayor
    return reglas

#ECUACIONES DIFERENCIALES CON RUNGE KUTTA
def diferencial_equation_x_y(t,x,y,r,pos,contador,contKL):
    global U, K, L, h, cuenta
    if contKL == 1:
        ALPHA = 0
    elif (contKL == 2) or (contKL == 3):
        ALPHA=.5
    elif contKL == 4:
        ALPHA = 1
    else:
        ALPHA=0

    t=t+h*ALPHA

    sumax=[]
    sumay=[]
    for i in range(len(r)):
        if pos<r[i]:
            A1=1
            B1=B(t,pos,r[i])
        elif pos>r[i]:
            A1=0
            B1=B(t,r[i],pos)
        sumax.append(U*.5*((-1)**(A1)*sin(B1)*(x[r[i]-1][contador] +
ALPHA*K[contKL-1][r[i]-1]) -\
cos(B1)*(y[r[i]-1][contador] + ALPHA*L[contKL-
1][r[i]-1])))
        sumay.append(U*.5*(cos(B1)*(x[r[i]-1][contador] +
ALPHA*K[contKL-1][r[i]-1]) +\
(-1)**(A1)*sin(B1)*(y[r[i]-1][contador] +
ALPHA*L[contKL-1][r[i]-1])))
        cuenta=cuenta+1
    return sum(sumax),sum(sumay)

```

```

w0 = 1/pi # FRECUENCIA DEL TIEMPO TAO
U = 0.1/w0#/np.sqrt(4*4**2-1)#.1/w0 # FRECUENCIA DE RABI'
phi = 0.000

Num= int(input("Number of Qubits: "))

zeta = int(input("Value of ZETA: "))
wz = np.zeros(Num)
for i in range(Num):
    wz[i] = 100 + i*zeta
w = list(wz/w0)

#INTERACCIÓN QUBIT-QUBIT (ISING)
if Num>1:
    interaction=float((input('Interaccion qubit-qubit: ')))/w0
    J = []
    for i in range(Num-1):
        J.append(interaction/((10**i)**i))

#ESTADOS POSIBLES DEL SISTEMA
estados=allstates(Num)

#ENERGIAS DEL SISTEMA
E=[]
for i in range(len(estados)):
    E.append(Energy(estados[i],w,J))

#DETERMINAR LAS REGLAS DE SELECCION
r = rules(Num)

#DELIMITACIONES DEL TIEMPO
pp = pi/U #PI PULSO
hpp = pi/(2*U)# PI MEDIO PULSO

# DELIMITACIONES DEL METODO NUMERICOC.
ti = 0 # TIEMPO INICIAL: siempre cero
tf1 = hpp # TIEMPOS FINALES DEFINIDOS POR PI-PULSOS
tf2 = tf1 + pp
tf3 = tf2 + pp
tf4 = tf3 + pp
tf5 = tf4 + pp
tf = tf5 + hpp # TIEMPO FINAL

h = 0.001 # TAMANHO DE PASO
n = int((tf-ti)/h) # NUMERO DE ITERACIONES

#FUNCION PARA DETERMINAR LA ENERGIA DE TRANSICION

```

```

W_kj = lambda k, j: (E[k-1] - E[j-1])/w0
theta = lambda t: w_mag*t + phi
B      = lambda t, k, j: W_kj(k,j)*t + theta(t)

```

```

#ARREGLOS PARA SOLUCIÓN NUMÉRICA

```

```

vx,vy,cx,cy,D = [],[],[],[],[]

```

```

for i in range (2**Num):
    vx.append(np.zeros(n))
    vy.append(np.zeros(n))
    cx.append(np.zeros(n))
    cy.append(np.zeros(n))
    D.append(np.zeros(n))

```

```

N = np.zeros(n)

```

```

T = np.zeros(n)

```

```

#CONDICIONES INICIALES DEL SISTEMA

```

```

vx[0][0] = 1

```

```

K = np.zeros((4+1, (2**Num)))

```

```

L = np.zeros((4+1, (2**Num)))

```

```

cuenta=0

```

```

w_mag = 0

```

```

for i in range (0,n-1):

```

```

    T[i+1]= T[i]+h

```

```

    if ( T[i+1] <= tf1 ):

```

```

        w_mag = W_kj(17,1)

```

```

    elif ( T[i+1] > tf1 and T[i+1] <= tf2 ):

```

```

        w_mag = W_kj(25,17)

```

```

    elif ( T[i+1] > tf2 and T[i+1] <= tf3 ):

```

```

        w_mag = W_kj(29,25)

```

```

    elif ( T[i+1] > tf3 and T[i+1] <= tf4 ):

```

```

        w_mag = W_kj(31,29)

```

```

    elif ( T[i+1] > tf4 and T[i+1] <= tf5 ):

```

```

        w_mag = W_kj(32,31)

```

```

    elif ( T[i+1] > tf5 and T[i+1] <= tf ):

```

```

        w_mag = 0

```

```

    #RUNGE KUTTA:

```

```

    for m in range(1,5):

```

```

        for j in range(2**Num):

```

```

FO-DGA-CPAP-0017

```

```

        K[m,j] =
h*diferential_equation_x_y(T[i],vx,vy,r[j],j+1,i,m)[0]
        L[m,j] =
h*diferential_equation_x_y(T[i],vx,vy,r[j],j+1,i,m)[1]

        cont=0
        for x in vx:
            x[i+1]=x[i]+(1/6)*( K[1,cont] + 2*K[2,cont] + 2*K[3,cont] +
K[4,cont] )
            cont=cont+1

        cont=0
        for y in vy:
            y[i+1]=y[i]+(1/6)*( L[1,cont] + 2*L[2,cont] + 2*L[3,cont] +
L[4,cont] )
            cont=cont+1

        for position in range(2**Num):
            cx[position][i] = vx[position][i]*cos(E[position]*T[i]) -
vy[position][i]*sin(E[position]*T[i])
            cy[position][i] = vx[position][i]*sin(E[position]*T[i]) +
vy[position][i]*cos(E[position]*T[i])
            D [position][i] = (cx[position][i])**2 + (cy[position][i])**2

for position in range(2**Num):
    cx[position][-1] = vx[position][-1]*cos(E[position]*T[-1]) -
vy[position][-1]*sin(E[position]*T[-1])
    cy[position][-1] = vx[position][-1]*sin(E[position]*T[-
1])+vy[position][-1]*cos(E[position]*T[-1])
    D [position][-1] = (cx[position][-1])**2+(cy[position][-
1])**2

N=sum(D)

plt.figure(figsize = (30,15))

plt.plot(T,N,label="Norm",color='k')
if Num <= 4:
    for l in range(2**Num):
        if l+1<10:
            plt.plot(T,D[l],label=f'D0{l+1}={estados[l]}')
        else:
            plt.plot(T,D[l],label=f'D{l+1}={estados[l]}')
if Num > 4:
    for l in range(2**Num):
        if l+1<10:
            plt.plot(T,D[l],label=str(l+1))
        else:
            plt.plot(T,D[l],label=str(l+1))

```



```
fig = plt.gcf()

ax = plt.subplot(111)
box = ax.get_position()
ax.set_position([box.x0, box.y0, box.width*0.8, box.height])
plt.legend(loc=1, bbox_to_anchor=(1.3, 1.0), frameon=False)
plt.grid()
plt.show()
```

**Anexo 2. Código en PYTHON para generar gráficas de las diferencias de diferencias de energías.**

```
#AÑADIR PAQUETERÍAS
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import seaborn as sns
import pandas as pd

#FUNCION PARA DETERMINAR PAQUETERÍAS PARA N QUBITS
def Energy(estado, N, w, J):
    #Recibe el estado "ijkl...", Numero de qubits "N", vector
    de w y vector de J.
    estado = np.array(estado)
    w = np.array(w)
    one = (-np.ones(N))**estado
    energy_NI = np.dot(one,w)
    estado = list(estado)
    energy_I = 0
    for j in range(N-1):
        for i in range(N-(j+1)):
            energy_I = energy_I + (J[j]*(-
1)**(estado[i]+estado[i+(j+1)]))
    Energy_States =-0.5*( energy_NI + 0.5*energy_I )
    return Energy_States

#NÚMERO DE QUBIT
n=int(input("Número de qubits: "))

w0 = 1
#CONSTANTES DE ACOPLAMIENTO
J=[0]*n
J[0]=5
J[1]=.5
#FRECUENCIAS DE LARMOR
```

```

zeta=int(input("Factor Zeta: "))
z=[]
for i in range(n):
    z.append(100+i*zeta)
w=z
#CODIGO PARA GENERAR LOS ESTADOS POSIBLES

def allstates(N):
    k = [ x for x in range(2**N) ]
    k[0] = np.arange(1)
    k[1] = np.arange(1,2)
    m = 1
    while m < N:
        for l in range(2**m):
            k[2**m + l] = np.concatenate(( np.arange(1), k[l]
))
            k[2**m + l][0] = 1
            k[l] = np.concatenate(( np.arange(1), k[l] ))
        m += 1
    return [ list(x) for x in k ]

a=allstates(n)
#DICCIONARIOS DE VARIABLES A NUMEROS
dictionary_v_n={f'{a[i]}':i+1 for i in range(len(a))}
#DICCIONARIOS DE NUMEROS A VARIABLES
dictionary_n_v={i+1:f'{a[i]}' for i in range(len(a))}

#INFORME DE DIFERENCIAS DE ENERGÍAS POR VECINDAD

categories=[[allstates(n-1) for prepend in (1, 0)] for j in
range(n)]

for j in range (n):

```

```

        for i in range(2**(n-1)):
            categories[j][0][i].insert(j,1)
            categories[j][1][i].insert(j,0)
Energy1=[]
Energy2=[]
Energy1name=[]
Energy2name=[]
for category in categories:
    for i in range(len(category[0])):
        Energy1.append(Energy(category[0][i],n,w,J))
        Energy2.append(Energy(category[1][i],n,w,J))

Energy1name.append(dictionary_v_n[f'{category[0][i]}'])

Energy2name.append(dictionary_v_n[f'{category[1][i]}'])


Energy_cat1name=np.split(np.array(Energy1name),n)
Energy_cat2name=np.split(np.array(Energy2name),n)

for i in range(n):
    Energy_cat1name[i]=list(Energy_cat1name[i])
    Energy_cat2name[i]=list(Energy_cat2name[i])

vdiff=np.array(Energy1)-np.array(Energy2)
vectorvdiff=np.split(vdiff,n)

EnergydifferenceNumberNotation=[]
for number in range(len(Energy1name)):
    if Energy2name[number]<10 and Energy1name[number]<10 :
        zdq='$E_{0'+str(Energy1name[number])+'}-
E_{0'+str(Energy2name[number])+'}$'
        EnergydifferenceNumberNotation.append(zdq)
    elif Energy1name[number]<10:

```

```

        zdq='$E_{0'+str(Energy1name[number])+'}-
E_{'+str(Energy2name[number])+'}$'
        EnergydifferenceNumberNotation.append(zdq)
    elif Energy2name[number]<10:
        zdq='$E_{'+str(Energy1name[number])+'}-
E_{0'+str(Energy2name[number])+'}$'
        EnergydifferenceNumberNotation.append(zdq)
    else:
        zdq='$E_{'+str(Energy1name[number])+'}-
E_{'+str(Energy2name[number])+'}$'
        EnergydifferenceNumberNotation.append(zdq)

print(f'Allowed transitions per category =
{len(vectorvdiff[1])}')
print("")
for i in range(n):
    print(f"For category w_{i+1}={w[i]}")
    maxim=max(vectorvdiff[i])-w[i]
    minim=min(vectorvdiff[i])-w[i]
    print(f'Max: {max(vectorvdiff[i])}-{w[i]}={maxim}')
    print(f'Min: {min(vectorvdiff[i])}-{w[i]}={minim}')
    print(f'Diametro = {maxim-minim}')
    print("")
#GENERACION DE ORGANIZACIÓN DE DATOS PARA GENERAR LA MATRIZ
EN UN DATAFRAME
valuesdiff=[]
for i in range(len(vdiff)):
    valuesdiff.append([vdiff[i]]*len(vdiff))
horizontal=np.matrix(valuesdiff)
vertical=np.matrix(valuesdiff).T

Mat_diff_diff=horizontal-vertical
Mat_diff_diff=np.tril(Mat_diff_diff)
diff_diff=pd.DataFrame(Mat_diff_diff)

```

```

diff_diff.columns=EnergydifferenceNumberNotation
diff_diff.index=EnergydifferenceNumberNotation

diff_diff=abs(diff_diff)
mask = np.zeros_like(diff_diff)
mask[np.triu_indices_from(mask)] = True

#IMPRIMIR TODOS LOS DATOS
sns.set(rc={'figure.figsize':(20,20)})
with sns.axes_style("white"):
    ax = sns.heatmap(diff_diff, mask=mask,
vmax=(2*J[0]+2*J[1]), square=True,
cmap='Blues',yticklabels=False, xticklabels=False

#CREAR SUBCATEGORÍAS
vector_dfcategory=[]
lengths=len(vdiff)/n
for i in range(n):

passenger=diff_diff.iloc[int(i*lengths):int((i+1)*lengths)]

bye_columns=EnergydifferenceNumberNotation[0:i*int(lengths)]+E
nergydifferenceNumberNotation[(i+1)*int(lengths):]
    passenger=passenger.drop(bye_columns, axis=1)
    vector_dfcategory.append(passenger)

#GENERAR LA IMPRESIÓN DE LA SUBCATEGORÍAS (MODIFICANDO LA
VARIABLE vector_dfcategory[0] )
mask2 = np.zeros_like(vector_dfcategory[0])
mask2[np.triu_indices_from(mask2)] = True
sns.set(rc={'figure.figsize':(15,15)},font_scale=2)
with sns.axes_style("white"):
    ax = sns.heatmap(vector_dfcategory[0], mask=mask2,
vmax=(2*J[0]+2*J[1]), square=True, cmap='Blues',
cbar=False,linewidths=.3)

```